



Escola Politècnica Superior  
d'Enginyeria de Manresa

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

# TRABAJO DE FIN DE GRADO

Evaluación del impacto medioambiental de la  
Industria Química a través de la utilización de  
software libre.

Grado en Ingeniería Química curso 2016-17

Autor: Irene Roselló Muñoz  
Director: Anna Bonsfills Pedrós  
Fecha: 07/07/2017  
Localidad: Manresa

---

## *RESUMEN*

---

En este trabajo se estudiarán los diferentes softwares libre gratuitos que están al alcance de los usuarios de internet hoy en día, y que nos permiten realizar un estudio de impacto medioambiental en este caso de la industria química. Estudiaremos todas sus características y posibilidades, para poder clasificarlos y compararlos. A través de su aplicación a diferentes casos tanto reales como hipotéticos podremos conocer la situación actual del tema que nos concierne.

Para la realización de este trabajo utilizaremos varios ámbitos de aplicación del estudio de impacto medioambiental como pueden ser la legislatura o una evaluación ambiental estratégica desarrollada por una empresa concreta.

Lo que intentaremos conseguir es una sinopsis de todas las posibilidades existentes para el estudio del impacto medioambiental, mediante este tipo de software probándolos en toda su capacidad y evaluando el detalle y aplicabilidad de los diferentes métodos.

---

## *SUMMARY*

---

Along this paper we will study different open source software available to internet users today. This will allow us to carry out an environmental impact study focused, in this case, on the chemical industry. We will study all characteristics and possibilities that every software gives us to be able to classify and compare them through its application to different real and hypothetical cases. All of this together will allow us to know the current situation regarding the subject concerning us.

To carry out this work we will use several areas of application of the environmental impact study such as the legislature or a strategic environmental assessment developed by a specific company.

We will try to achieve a synopsis of all the possibilities available for the study of the environmental impact through this type of software, testing them in their full capacity and evaluating the detail and applicability of the different methods.

---

## ÍNDICE

---

1. INTRODUCCIÓN .....	9
2. ESTADO DEL ARTE.....	10
3. OBJETIVOS .....	13
4. TIPOS DE SOFTWARE.....	14
5. DESCRIPCIÓN DETALLADA DE SOFTWARE LIBRES PARA EVALUACIÓN DE IMPACTO AMBIENTAL (EIA).....	16
5.1. PROGRAMA EPISuite.....	17
5.1.1. Información básica.....	17
5.1.2. Interfaz y uso.....	21
5.1.3. Análisis DAFO.....	26
5.2. PROGRAMA EIA09 .....	27
5.2.1. Información básica.....	27
5.2.2. Interfaz y uso.....	30
5.2.3. Análisis DAFO.....	33
5.3. PROGRAMA TANKS.....	34
5.3.1. Información básica.....	34
5.3.2. Interfaz y uso.....	36
5.3.3. Análisis DAFO.....	41
5.4. PROGRAMA BEES. ....	42
5.4.1. Información básica.....	42
5.4.2. Interfaz y uso.....	45
5.4.3. Análisis DAFO.....	49
5.5. PROGRAMA Mackay Level III. ....	50
5.5.1. Información básica.....	50
5.5.2. Interfaz y uso.....	54
5.5.3. Análisis DAFO.....	59
5.6. PROGRAMA IRIS. ....	60
5.6.1. Información básica.....	60
5.6.2. Interfaz y uso.....	64
5.6.3. Análisis DAFO.....	66

6.	COMPARACIÓN DE LOS TIPOS DE SOFTWARE .....	67
7.	CASOS DE ESTUDIO .....	69
7.1.	CASO DE ESTUDIO 1: Síntesis del Acetaldehído.....	70
7.1.1.	Objetivo.....	70
7.1.2.	Desarrollo.....	71
7.1.3.	Resultados .....	74
7.1.4.	Conclusiones .....	80
7.2.	CASO DE ESTUDIO 2: Proyecto instalación EDAR.....	81
7.2.1.	Objetivos .....	81
7.2.2.	Desarrollo.....	82
7.2.3.	Resultados .....	83
7.2.4.	Conclusiones .....	83
7.3.	CASO DE ESTUDIO 3: Uso del clorobenceno en la industria textil.....	84
7.3.1.	Objetivos .....	84
7.3.2.	Desarrollo.....	84
7.3.3.	Resultados .....	85
7.3.4.	Conclusiones .....	86
7.4.	CASO DE ESTUDIO 4: Instalación electrolito con Arsénico.....	87
7.4.1.	Objetivos .....	87
7.4.2.	Desarrollo.....	87
7.4.3.	Resultados .....	88
7.4.4.	Conclusiones .....	88
7.5.	CASO DE ESTUDIO 5: Construcción de una nave industrial.....	89
7.5.1.	Objetivos .....	89
7.5.2.	Desarrollo.....	89
7.5.3.	Resultados .....	91
7.5.4.	Conclusiones .....	95
7.6.	CASO DE ESTUDIO 6: Planta refinadora de petróleo.....	96
7.6.1.	Objetivos .....	96
7.6.2.	Desarrollo.....	96
7.6.3.	Resultados .....	98
7.6.4.	Conclusiones .....	101
8.	CONCLUSIONES FINALES.....	102
9.	REFERENCIAS.....	103

---

## *RELACIÓN DE TABLAS*

---

Tabla 1: Clasificación software. ....	15
Tabla 2: Resumen datos básicos EPISuite. ....	18
Tabla 3: Análisis DAFO software EPISuite. ....	26
Tabla 4: Resumen EIA09.....	28
Tabla 5: Tabla análisis DAFO software EIA09. ....	33
Tabla 6: Tabla resumen datos básicos TANKS. ....	35
Tabla 7: Tabla análisis DAFO software TANKS. ....	41
Tabla 8: Tabla resumen datos básicos BEES. ....	43
Tabla 9: Tabla análisis DAFO software TANKS. ....	49
Tabla 10: Resumen datos básicos TANKS. ....	51
Tabla 11: Tabla análisis DAFO software Mackay Level III. ....	59
Tabla 12: Tabla resumen dato básicos IRIS .....	61
Tabla 13: Tabla análisis DAFO IRIS. ....	66
Tabla 14: Tabla comparación software. ....	68
Tabla 15: Tabla resumen datos del problema. ....	72
Tabla 16: Tabla actualizada de datos del problema .....	73
Tabla 17: Tabla resumen resultados TANKS para el etileno .....	75
Tabla 18: Tabla actualizada de datos del problema .....	75
Tabla 19: Tabla resumen resultados TANKS para el acetaldehído. ....	76
Tabla 20: Inmisiones substancias para la población de Albania etileno. ....	77
Tabla 21: Inmisiones para la población de Albania para el acetaldehído. ....	78
Tabla 22: Tabla resultados Mackay Level III para el etileno .....	79
Tabla 23: Tabla resumen factores ambientales y socioeconómicos relevantes. ....	82-83
Tabla 24: Resultados evaluación de alternativas. ....	83

Tabla 25: Tabla resultados Mackay Level III para la emisión de cloro benceno. ....	86
Tabla 26: Tabla resultados BEES para la construcción de la nave industrial.....	91-93
Tabla 27: Tabla resumen emisiones totales de CO2.....	94-95
Tabla 28: Promedio rendimiento de un barril de crudo («El petróleo y su proceso de refinación (página 2) - Monografias.com»).....	97
Tabla 29: Tabla resultados Mackay Level III para la emisión de parafinas. ....	99
Tabla 30: Tabla resumen datos del problema. ....	100
Tabla 31: Tabla resumen resultados TANKS para el etileno. ....	100
Tabla 32: Inmisiones parafinas para la población de Chicago. ....	100

---

## *RELACIÓN DE FIGURAS*

---

Figura 1: Captura de pantalla interfaz EPISuite .....	21
Figura 2: Listado de programas integrados en EPISuite.....	22
Figura 3: Opciones en el interfaz de EPISuite .....	22
Figura 4: Cuerpo principal interfaz EPISuite.....	23
Figura 5: Captura pantalla selección de sustancia química a estudiar .....	23
Figura 6: Captura de pantalla interfaz después de seleccionar nuestro elemento de estudio.....	24
Figura 7: Informe EPISuite sobre nuestra sustancia de estudio.....	25
Figura 8: Figura extraída de (Gutiérrez-Martín et al. 2014) información sobre el carbaryl generada por EPISuite. ....	26
Figura 9: Screenshot diagrama implementación EIA09 del artículo (Minguez et al.) .....	29
Figura 10: Pantalla principal EIA09 («EIA09 Project Page»).....	30
Figura 11: Pantalla introducción información básica del proyecto («EIA09 Project Page»). ....	30
Figura 12: Lista de factores de impacto («EIA09 Project Page»).....	31
Figura 13: Listado diferentes alternativas («EIA09 Project Page») .....	31
Figura 14: Mensaje de valoración de alternativas («EIA09 Project Page») .....	32
Figura 15: Informe de alternativas («EIA09 Project Page»).....	32
Figura 16: Pantalla principal del programa TANKS .....	36
Figura 17: Menú simplificado para selección de tanques. ....	36
Figura 18: Menú principal del programa .....	37
Figura 19: Menú principal del programa. ....	37
Figura 20: Pestaña “Physical characteristics”.....	38
Figura 21: Pestaña “Site selection”. ....	39
Figura 22: Pestaña “Tank contents”. ....	39

Figura 23: Pestaña “Monthly calculations” .....	40
Figura 24: Generación de Reports. ....	41
Figura 25: Diagrama de flujo, imagen extraída de la página web BEES. ....	44
Figura 26: Página web BEES.....	45
Figura 27: Major group element .....	46
Figura 28: Group element .....	46
Figura 29: Individual element. ....	47
Figura 30: Alternativas sugeridas por BEES para el elemento seleccionado .....	47
Figura 31: Valor en millas por la alternativa en cuestión. ....	48
Figura 32: Tabla comparativa autogenerada por el software. ....	48
Figura 33: Pantalla principal programa Mackay Level III. ....	54
Figura 34: Pantalla nombre del proyecto («EIA09 Project Page».).....	54
Figura 35: Pantalla propiedades químicas .....	55
Figura 36: Pantalla propiedades medioambiente .....	56
Figura 37: Pantalla de emisiones y afluentes .....	57
Figura 38: Diagrama de descargas Mackay Level III.....	58
Figura 39: Resultados obtenidos con Mackay Level III .....	58
Figura 40: Diagrama de flujo generación de informes toxicológicos por IRIS .....	62
Figura 41: Página principal del apartado IRIS en la web oficial de la EPA .....	64
Figura 42: Menú principal del apartado IRIS en la web oficial de la EPA .....	65
Figura 43: Ejemplo Carbaryl informe simplificado en IRIS. ....	66
Figura 44: Reacción de oxidación del etanol ((«100cia Química – Experiencias de laboratorio - Química de 2o de BAC»)) .....	70
Figura 45: Tanque teórico contenedor de Etileno («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos   Superintendencia de Industria y Comercio»)) .....	72
Figura FIGURA 46: Pantalla de error TANKS. ....	73



Figura 47: Tanque real contenedor de Etileno («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos   Superintendencia de Industria y Comercio»)	74
Figura 48: Tanque real contenedor de Etileno («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos   Superintendencia de Industria y Comercio»)	76
Figura 49: Diagrama de cargas y descargas generado por Mackay Level III	78
Figura 50: Diagrama de cargas y descargas generado por Mackay Level III	79
Figura 51: Pantalla de error TANKS ((«Proyecto Biosfera»).	81
Figura 52: Estructura de un cloro benceno («Clorobenceno - Wikipedia, la enciclopedia libre»)	84
Figura 53: Valores para emisiones standard Mackay Level III	85
Figura 54: Diagrama descargas Cloro benceno Mackay Level III	85
Figura 55: Información sobre Arsénico	87
Figura 56: Menú selección opciones («VENTA EDIFICIO CORPORATIVO PARQUE TECNOLOGICO   Venta   Parque Tecnológico Paterna»)	89
Figura 57: Tabla peso de los factores («BEES»)	90
Figura 58: Diagrama columna de fraccionamiento de petróleo («Foro: Fraccionamiento del petróleo (1/1)»)	96
Figura 59: Diagrama descargas y sub-descargas Mackay Level III	98
Figura 60: Tanque contendor de parafinas («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos   Superintendencia de Industria y Comercio»)	99

## *1. INTRODUCCIÓN*

---

Según estudios realizados por múltiples asociaciones y organismos la preocupación por el medioambiente ha ido creciendo en los últimos años, dichos estudios demuestran que una vez tenemos cubiertas las necesidades nuestra preocupación se centra en el medioambiente. También la evolución del perfil de consumidor en estos últimos años ha acentuado la importancia de consumir productos que son manufacturados, diseñados y funcionales para preservar el medio ambiente, por lo que, entre dos productos con un mismo precio de venta y mismas cualidades el cliente siempre se decanta por aquel que asegura respetar el medio ambiente.

De la misma manera las industrias en conjunción con los gobiernos mundiales han ido adaptándose a las necesidades de la población hasta el punto de convertir en requisito principal para el desarrollo de nuevos proyectos el respeto y equilibrio con el entorno. Por lo que en los últimos veinte años han aparecido un gran número de normas, legislaciones y guías que nos ayudan a cumplir con dichos requisitos.

Por estas razones las Evaluaciones de impacto medioambiental se han convertido en un documento indispensable a la hora de desarrollar proyectos en una larga lista de países, de aquí nace la necesidad de inventar y reinventar métodos auxiliares a la hora de redactar este tipo de documentos, de justificar las decisiones tomadas y optimizar el curso del diseño y desarrollo de los diferentes proyectos. En este trabajo nos centraremos en todas las herramientas de acceso libre que nacieron de esta necesidad, que pretenden socorrer y apoyar al autor y su trabajo.

A pesar de los avances en los últimos años debemos seguir trabajando para mejorar la relación entre la sociedad y el medio ambiente, animando a todos los países a comprometerse con esta causa y educar a las futuras generaciones en los valores de coexistencia de medioambiente y sociedad. Esta será la única manera de llegar a optimizar los procesos industriales hasta el punto de convertirlos en eficientes y sostenibles, y de conservar este nuestro planeta.

---

## 2. ESTADO DEL ARTE

---

Después de la segunda guerra mundial la industrialización vertiginosa de los países poderosos empezó a consternar a la población sobre los impactos negativos de la misma en el medio ambiente, así fue como en 1970 Estados Unidos decidió responder a estos problemas creando el “National Environmental Policy Act” (Huertas-Olivares y Norris 2013). Estados Unidos resulto ser (hasta hoy en día) un país pionero en lo que hoy conocemos como EIA (Evaluación de Impacto Ambiental) al que se ha ido sumando otros países desarrollados.

El hecho de tener en cuenta el factor de impacto ambiental en proyectos de gran escala suponía un problema para los grandes empresarios, de manera que el World Bank Group decidió apoyar proyectos los cuales poseían una evaluación de impactos ambientales previa al desarrollo del mismo. Gracias al World Bank Group estas medidas preventivas y planes de acciones se empezaron a ver más a menudo en proyectos grandes e importantes.

La Evaluación de impacto ambiental surge ante la necesidad de conservar el medioambiente para que futuras generaciones puedan también disfrutar de él como nosotros.

Hasta el día de hoy las diversas herramientas que tenemos a nuestro alcance han ido evolucionando para cumplir con la tarea de redacción de una Evaluación de impacto ambiental (EIA) mucho más sencilla, desde bases de datos de compuestos químicos pasando por listas de los productos más verdes para la construcción hasta robustos software de cálculo, en este tema se centrara la temática de este trabajo. Los sistemas computarizados de apoyo a la toma de decisiones (CDSSs) son herramientas primordiales para el apoyo a la gestión de ecosistemas contaminados o en peligro de contaminación (Bäverstam et al., 1997; Schulte et al., 2002). Existen diversas aplicaciones de estos sistemas los cuales surgen de la necesidad de una herramienta rápida y de confianza para la evaluación de problemas como por ejemplo el impacto de un accidente nuclear en el agua fresca de un entorno concreto en un área geográfica. Como se demostró con el accidente de Chernobyl, grandes regiones pueden verse afectadas por este tipo de accidentes nucleares quedando afectados tanto el territorio como la economía de países enteros (Hofman et al. 2011).

Los beneficios del uso de este tipo de herramientas son muchos como pueden ser el ahorro económico y la simplificación del procedimiento (nos proporciona información en forma de gráficos, ordenada y mucho más concisa), pero con el creciente uso de este tipo de herramientas, que cubren en efecto una necesidad real en el mundo de la empresa, debemos tener muchas consideraciones a la hora de seleccionar y filtrar la información obtenida. Muchos de estos software dependen de grandes bases de datos experimentales los cuales queremos que sean de calidad para poder desarrollar estudios coherentes y robustos (Canter). Siempre dependeremos de estas bases de datos, ya que, la evaluación de impacto ambiental no es una ciencia exacta por su propia naturaleza.

Una vez entendemos lo útiles y peligrosas que pueden resultar estas herramientas abordamos una tercera fase en la cual encontramos el problema de la flexibilidad, estos programas son a menudo concretos y extremadamente limitados por lo que deberemos encontrar los más adecuados para cada caso de manera individual y aislada lo que nos lleva a comprender que en muchos casos el uso de una sola herramienta pueda ser inconcebible y que probablemente la mejor opción sea la combinación de varias de las mismas («Click to screen: EIA software | the environmentalist» 2012) . En la actualidad un gran número de herramientas se encuentran disponibles al alcance de todo el mundo y debemos seguir alentando desarrollo de estas siempre y cuando tengamos presente que también es necesaria la recolección de información útil y veraz para que cada vez estos programas auxiliares sean más robustos.

El proceso de evaluación del impacto ambiental depende en gran medida de elementos de interpretación y predicción subjetivos, como la determinación de la significación para cualquier impacto potencial identificado sobre cualquier receptor dado («Click to screen: EIA software | the environmentalist» 2012), lo que nos deja presente el hecho de que estas herramientas nunca podrán sustituir el juicio de un experto en la materia y que siempre necesitaremos poseer un conocimiento básico sobre el cual poder construir decisiones bien cimentadas.

A pesar de los grandes avances de la comunidad científica en esta materia la implementación de este tipo de estudios es casi exclusiva de los grandes proyectos financiados por diferentes grandes instituciones, además, de que una gran mayoría de los países industrializados no han implantado ninguna medida (o lo han hecho, pero con una gran demora respecto al resto) de manera que en desde 2006 hasta hoy en día solo 37 países se han comprometido con los *Equator Principles* lo que supone un 70% de la deuda internacional en mercados emergentes (Morgan 2012). Estos principios consisten en 90 directrices que construyen un marco legal para proporcionar un estándar mínimo para apoyar la toma responsable de decisiones sobre riesgos medioambientales (The equator principles Association [sin fecha]).

Para asegurar la implantación e implementación de esta práctica existen tanto a nivel europeo, nacional o Internacional una serie de congregaciones y organismos los cuales velan por el futuro del E.I.A y por seguir desarrollando e investigando, aplicando este factor medioambiental en todos los proyectos que se llevan a cabo.

Algunas de ellas son:

- [EIA Asociación española de evaluación de impacto ambiental](#), se fundó en 1993 y se define como un órgano de consulta, debate, iniciativas...para la cual existe la finalidad última del desarrollo de la Evaluación ambiental como instrumento de defensa del medio ambiente al servicio de la sociedad.
- [EMAS Eco - Management and Audit Scheme](#), es un instrumento de gestión de desarrollado por la Comisión Europea para empresas y otras organizaciones que se dedica a evaluar, informar y mejorar el desempeño ambiental de las mismas. EMAS está abierto a todo tipo de organización que desee mejorar su rendimiento medioambiental. Abarca todos los sectores económicos y de servicios y es aplicable en todo el mundo.

- [IAIA International Association for Impact Assessment](#), la IAIA es la principal red mundial de mejores prácticas en el uso de la evaluación de impacto para la toma de decisiones informadas sobre políticas, programas, planes y proyectos. Los miembros de la IAIA creen que la evaluación de impacto es una herramienta práctica para ayudar a satisfacer las necesidades de hoy sin comprometer las oportunidades de las generaciones futuras.
- [EPA Environmental Protection Agency](#), es una agencia estadounidense y una de las más importantes a nivel mundial cuya misión es proteger la salud humana y el medio ambiente.

---

### *3. OBJETIVOS*

---

- Objetivos del trabajo:
  - Conocer los software libres que hay en la red disponibles para la evaluación de impacto ambiental de la industria química.
  - Poder comparar y elegir los programas que resulten más robustos y útiles.
  - Realizar casos de estudio utilizando dichas herramientas.

---

## 4. TIPOS DE SOFTWARE

---

Existen ya muchas clasificaciones diferentes para este tipo de herramientas, aunque ninguna consigue separarlas de una manera lo suficientemente clara y concisa. Este tipo de programas resultan sumamente difíciles de ordenar sino imposibles debido a sus múltiples fines y cualidades.

Una de las clasificaciones que resultan más eficientes es la propuesta siguiente (Håkanson y Monte, 2003; Hofman, 2004; Ríos-Insua et al., 2006):

- Modelos para predecir el comportamiento temporal de los radionúclidos en medios de agua dulce, los efectos de las intervenciones (Contramedidas y acciones de restauración) y los consecuentes impactos ecológico, social y económico.
- Herramientas de clasificación de los impactos mencionados anteriormente.
- Software que realizan modelos y metodologías anteriores, uniendo todos los componentes del CDSS en un interfaz amigable para el usuario.
- Herramientas de almacenamiento y análisis de datos, como bases de datos y sistemas de Información Geográfica (SIG).

Esta clasificación se basa en el fin de nuestros programas para ordenarlos en función de su uso, para el fin de este trabajo interesa que la clasificación nos dé una idea aproximada también de cuál de los programas estudiados es el más completo, por eso, para la gestión correcta de todos los software que se estudian en este trabajo primero los clasificaremos, de esta manera podremos compararlos de una manera mucho más lógica, correcta y eficiente.

La clasificación de estos programas no resulta una tarea fácil, ya que como hemos dicho anteriormente, son inmensamente diferentes. Todos los software tratados en este TFG son de tipo aplicación, ya que, nos ayudan a gestionar bases de datos y generar documentos de texto y cálculos complejos.

Para realizar esta tarea hemos creado una serie de grupos característicos según los cuales cada uno recibirá una puntuación previamente acordada y que hará referencia a la consistencia del software en sí mismo sin el apoyo de bases de datos adicionales u otros tipos de herramientas.

Al final de la clasificación tendremos tres grupos bien diferenciados, con esta segmentación continuaremos el desarrollo del trabajo.

La puntuación consistirá en recibir 1 punto por cada característica propia del software siendo de esta manera la puntuación máxima 7 y la mínima 1. Podemos ver el detalle de la clasificación en la Tabla 1.

Tabla 1. Clasificación software.

<b>PROGRAMA</b>	<b>CARACTERÍSTICA</b>							<b>Puntuación</b>
	Considera las emisiones negativas al medioambiente	Software generación EIA	Base de datos propia	Proporciona resultados numéricos	Acepta más de una variable	Permite el estudio de mezclas	Genera informes de resultados	
<b>EPISuite</b>	✓		✓	✓			✓	<b>4</b>
<b>TANKS</b>	✓			✓	✓	✓		<b>4</b>
<b>BEES</b>	✓		✓	✓			✓	<b>4</b>
<b>IRIS</b>			✓				✓	<b>2</b>
<b>Mackay Level III</b>	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	<b>7</b>
<b>EIA09</b>	✓	✓		✓	✓	✓	✓	<b>6</b>

**A. Herramientas generación de Evaluación de impacto ambiental (6-7).**

- a. Mackay Level III
- b. EIA09

**B. Herramientas de soporte par Evaluación de impacto ambiental (3-5).**

- a. TANKS
- b. BEES
- c. EPISuite

**C. Herramientas complementarias para Evaluación de impacto ambiental. (1-2)**

- a. IRIS

Por puntuación dividimos los programas en tres grupos que valoran en la gran parte la autonomía del programa. De la misma manera debemos subrayar el hecho de que sin IRIS la mayoría de los programas no tendrían los cimientos para empezar a trabajar por lo que ninguno de los software estudiados resulta una herramienta de uso aislado con la cual no necesitaríamos ninguna complementaria.

Esta clasificación nos ayudara a la hora de comparar los diferentes programas y evaluarlos.



---

## 5. DESCRIPCIÓN DETALLADA DE SOFTWARE LIBRES PARA EVALUACIÓN DE IMPACTO AMBIENTAL (EIA).

---

En este apartado realizaremos un análisis descriptivo detallado del funcionamiento y características de algunos programas de ayuda al estudio medioambiental y de ciclo de vida de materias primas.

Los programas que se describen en este trabajo son programas de código abierto que están al alcance de todo el mundo de manera gratuita en la red, este requisito o requerimiento pretende concienciar en la importancia de hacer accesibles este tipo de herramientas a pequeñas industrias, estudiantes, profesores y cualquiera que sienta cierto interés o curiosidad con el tema de esta manera lograremos que la conciencia medioambiental crezca y se afiance en la sociedad para que luego resulte algo evidente el responsabilizarse de los actos hacia el medioambiente respondiendo ante ellos e intentando minimizarlos en la medida de lo posible.

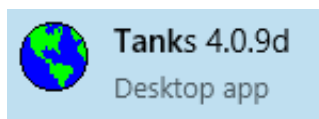
También existen herramientas de este tipo que son mucho más sofisticadas y que están enfocadas al uso por las grandes empresas. Estos software son recursos privados para resolver la necesidad de la redacción de la EIA para grandes proyectos y facilitan en gran medida el proceso. Aunque de todos modos muchas asociaciones y gobiernos apoyan el uso de recursos (sobre todo bases de datos) generados por ellos mismos, como en el caso de la EPA, los cuales aportan veracidad y están siempre disponibles para todo el mundo.

El hecho de trabajar con herramientas de uso más específico nos ayuda a entender mejor nuestro proyecto y a veces resulta positivo a la hora de finalmente tomar decisiones al respecto.

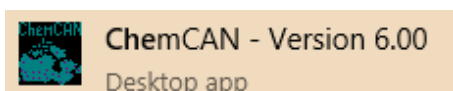
En este trabajo solo aparece una muestra de la diversidad de software que están hoy en día disponibles los cuales han resultado más interesantes y prácticos con respecto al tema principal de nuestro trabajo.



*Software BEES*



*Software TANKS*



*Software Mackay Level III*



*Software EIA09*



*Software EPISuite*



*Software IRIS*

## 5. 1.- PROGRAMA EPISuite.

### 5.1.1. Información básica

**Nombre del programa:** EPISuite v.4.11

**Desarrollador:** Environmental Protection Agency y Syracuse Research Corp. (SRC).

**Fuente:** U.S. Environmental Protection Agency

**Año:** 2012

#### **Descripción y características del programa:**

Este software se utiliza para estimar el comportamiento de sustancias químicas en un sistema biológico o ambiental basado en sus propiedades físicas, químicas y ambientales. EPI Suite se utiliza habitualmente en la evaluación de nuevos productos químicos en virtud de la EPA Premanufacture Notices (PMN) para los nuevos productos químicos en virtud de la sección 5 de la Ley de Control de Sustancias Tóxicas, y es ampliamente utilizado para predecir propiedades físicas y químicas, el destino ambiental y propiedades de transporte de productos químicos ya en el comercio (US EPA).

EPI Suite <sup>TM</sup> realiza sus cálculos utilizando estos programas integrados en el mismo programa:

1. AOPWIN – estima la velocidad de oxidación atmosférica
2. BCFWIN – estima el factor de bio-concentración (BCF)
3. BIOWIN – estima la probabilidad de biodegradación
4. ECOSAR – estima la toxicidad acuática (LD50, LC50)
5. HENRYWIN – estima la constante de Henry
6. HYDROWIN – estima la velocidad de hidrólisis acuática (ácido-base catalizado)
7. KOWWIN – estima el coeficiente de partición octano-agua
8. MPBPWIN – estima el punto de fusión, punto de ebullición y la presión de vapor.
9. PCKOCWIN – estima el coeficiente de absorción y adsorción de suelos (Koc).
10. WSKOWWIN – estima la solubilidad en agua (a partir del log de partición octano-agua)
11. WATERNT – estima la solubilidad en agua (usando la metodología de fragmentación de átomos)

**Este software se puede conseguir en:**



La Tabla 2 es una Tabla resumen de los datos más relevantes de descripción de este software. Podemos encontrar las variables de entrada y salida, las diferentes versiones de este programa además de información mencionada anteriormente, ordenada de una manera más clara y visual.

Tabla 2. Tabla resumen datos básicos EPISuite.

Nombre	Fuente	Año	Versiones	Objetivo del programa	Subprogramas	Variables de entrada	Variables de salida
<b>EPISuite v.4.11</b>	Environmental Protection Agency y Syracuse Research Corp. (SRC).	Noviembre de 2012	EPISuite v.4.11	EPI (Interfaz de Programas de Estimación) Suite™ es un programa basado en Windows® para la estimación de propiedades físicas / químicas de destino ambiental desarrollado por la EPA y Syracuse Research Corp. (SRC). EPI Suite™ es una herramienta de nivel de detección y no debe utilizarse si se dispone de valores de medición aceptables.	AOPWIN	Nombre químico, CAS y SMILE	Velocidad de oxidación atmosférica
			EPISuite v.4.1		BCFWIN	Constante de la Ley de Henry	Factor de bio-concentración (BCF)
			EPISuite v.4.0		BIOWIN	Punto de fusión	Probabilidad de biodegradación
			EPISuite v3.2		ECOSAR	Punto de evaporación	Toxicidad acuática (LD50, LC50)
			EPISuite v3.1		HENRYWIN	Solubilidad en agua	Constante de Henry
			EPISuite v2.1.1		HYDROWIN	Presión de vapor	Velocidad de hidrólisis acuática
			EPISuite v2.1.		KOWWIN	Log Kow	Coefficiente de partición octano-agua
			EPISuite v2.0		MPBPWIN	Profundidad del agua (Ríos/Lagos)	Punto de fusión, punto de ebullición y la presión de vapor.
			EPISuite v1.1.0		PCKOCWIN	Velocidad del viento (Ríos/Lagos)	Coefficiente de absorción y adsorción de suelos (Koc).
			EPISuite		WSKOWWIN	Velocidad del corriente (Ríos/Lagos)	Solubilidad en agua (a partir del log de partición octano-agua)
			EPIWIN (Before EPA's purchase of Brand)		WATERNT		Solubilidad en agua (usando la metodología de fragmentación de átomos.

Esta herramienta nos proporciona muchas variables de salida las cuales se explican a continuación:

- Velocidad de oxidación atmosférica: Es la rapidez con la que la sustancia pierde electrones cuando lo liberamos a la atmósfera.
- Factor de bio-concentración (BCF): Es la concentración de una sustancia en un pez, o en tejidos determinados de éste [C1, expresada en  $\mu\text{g/g}$  (ppm)] dividida por la concentración de la sustancia en el medio ambiente [C2, expresada en  $\mu\text{g/mL}$  (ppm)] («Factor de bioconcentración»).
- Probabilidad de biodegradación: Es la posibilidad de que esta sustancia se degrade de manera biológica.
- Toxicidad acuática (LD50, LC50): LD50 es la dosis letal de una sustancia para eliminar al 50% de la población de animales a los cuales se somete a la prueba de toxicidad y LC50 es la concentración letal de la sustancia química en agua que de la misma manera eliminaría al 50% de la población de estudio («Factor de bioconcentración»).
- Constante de Henry: Es un factor que determina la relación entre la concentración de un gas disuelto y la presión parcial que el mismo ejerce, este factor depende de la naturaleza del gas, el líquido en el que está disuelto y su temperatura.
- Velocidad de hidrólisis acuática:
- Coeficiente de partición octano-agua: Mide la lipoafinidad e hidrofobicidad de la sustancia.
- Punto de fusión, punto de ebullición y la presión de vapor: La presión de vapor de un líquido es la presión ejercida por su vapor cuando ambas fases están en equilibrio dinámico. La temperatura a la que el líquido comienza a cambiar a fase gaseosa es lo que llamamos punto de ebullición el mismo caso para el punto de fusión este corresponde a la temperatura a la cual el sólido cambia a fase líquida («Presión de Vapor y Punto de Ebullición»).
- Coeficiente de absorción y adsorción de suelos (Koc): Razón entre la concentración de plaguicida en estado de adsorción (es decir adherido a las partículas de suelo) y la fase de solución (es decir, disuelto en el agua del suelo) («Evaluación de la contaminación del suelo»).
- Solubilidad en agua: Capacidad de una sustancia para disolverse en agua

EPISuite es un software que se basa principalmente en dos paquetes de estimación que este programa incorpora BIOWIN y AOPWIN.

- ✓ Biowin es un programa para el cálculo de probabilidad de biodegradación de sustancias químicas. Está compuesto de 7 paquetes diferentes. EPISuite solo contiene Biowin 3, este modelo es un modelo encuesta ya que se presentó en un panel de expertos en la materia para decidieran cuáles son las tasas previstas para la degradación más realistas y correctas (pérdida de la identidad química de los padres), lo mismo para degradación final (conversión a  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ ) en condiciones aerobias (Lim 2016).

- ✓ Aopwin es un programa de oxidación atmosférica que estima la relación entre los radicales hidroxiles foto químicamente producidos con la concentración de sustancias químicas orgánicas en el aire en ciertas condiciones atmosféricas en cierto medio. También estima la relación entre el ozono y los compuestos olefínicos. Las constantes estimadas se utilizan para el cálculo de la vida media de compuesto orgánicos en la atmósfera.

La constante de reacción del grupo hidroxilo con compuestos orgánicos se calcula de la siguiente manera en AOPWIN (Lim 2016):

$$\begin{aligned}
 K_{total} &= k(\text{from } C - H \text{ and } O - H) + k(OH \text{ addition to } >C=C< \text{ and } -C \\
 &\quad \equiv C - \text{bonds}) \\
 &= k(OH \text{ addition to aromatic rings}) \\
 &\quad + k(OH \text{ interaction with } N-, S-, \text{ and } P- \text{ containing groups})
 \end{aligned}$$

### 5.1.2. Interfaz y uso

En este apartado vamos a realizar una demostración básica del funcionamiento y el aspecto del software. Para empezar, estudiaremos la apariencia principal del programa (figura 1):

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen. At the top, there is a menu bar with options: File, Edit, Functions, Batch Mode, Show Structure, Output, Fugacity, STP, and Help. Below the menu bar is a blue header with the text "EPI Suite - Welcome Screen". On the left side, there is a vertical list of program buttons: AOPWIN, KOWWIN, BIOWIN, MPBPVP, WSKOW, WATERNT, HENRYWIN, KOAWIN, KOCWIN, BCFBAF, HYDROWIN, BioHCwin, DERMWIN, ECOSAR, and EPI Links. The main area contains input fields for "Input CAS #", "Input Smiles:", and "Input Chem Name:". Below these are buttons for "Name Lookup", "PhysProp", "Previous", "Get User", "Save User", "Search CAS", and "Calculate". There are also checkboxes for "Output" (Full and Summary) and a "Clear Input Fields" button. The bottom section contains a disclaimer and copyright information.

The Estimation Programs Interface (EPI) Suite™ was developed by the US Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention and Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC). It is a screening-level tool, intended for use in applications such as to quickly screen chemicals for release potential and "bin" chemicals by priority for future work. Estimated values should not be used when experimental (measured) values are available.

EPI Suite™ cannot be used for all chemical substances. The intended application domain is organic chemicals. Inorganic and organometallic chemicals generally are outside the domain.

Important information on the performance, development and application of EPI Suite™ and the individual programs within it can be found under the Help tab. Copyright 2000-2012 United States Environmental Protection Agency for EPI Suite™ and all component programs except BioHCWIN and KOAWIN.

Figura 1. Captura de pantalla interfaz EPISuite (US EPA).

En la parte izquierda de la pantalla podemos observar todos los programas que utiliza EPI Suite para realizar todos los cálculos pertinentes, podemos seleccionarlos para calcular factores concretos de manera independiente (figura 2).

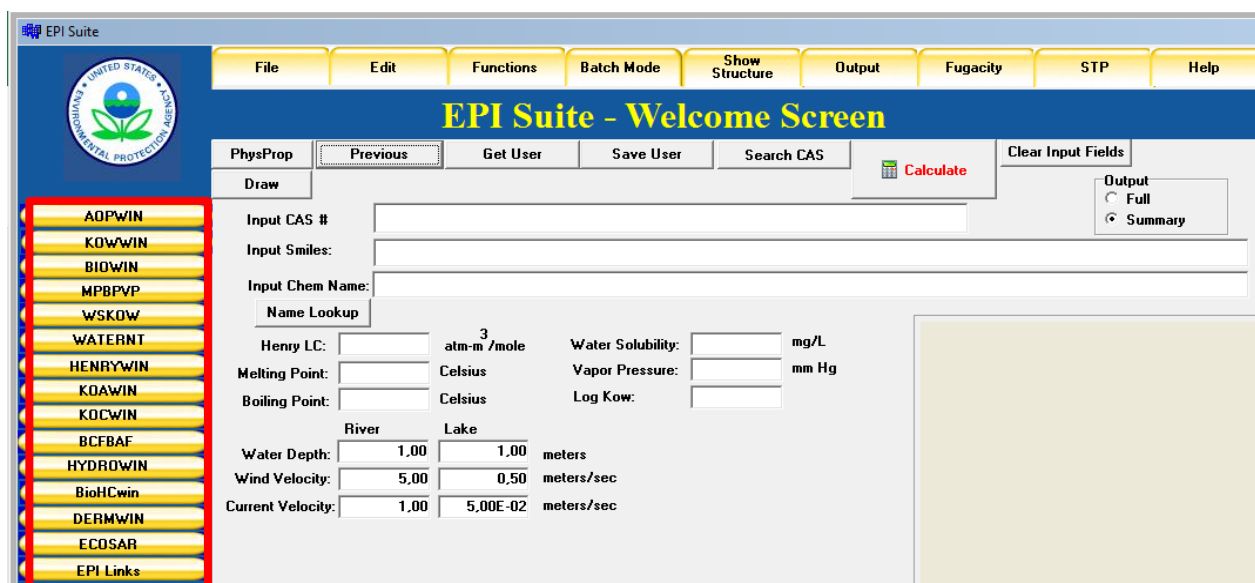


Figura 2. Listado de programas integrados en EPISuite (US EPA) .

En la parte superior encontramos las opciones básicas de edición para la generación de informes (figura 3).



Figura 3. Opciones en el interfaz de EPISuite (US EPA).

Por lo último en la parte central de la interfaz de inicio del programa encontramos los espacios de introducción y selección de datos, consulta de información relevante y generación de resultados (Figura 4).

Figura 4. Cuerpo principal interfaz EPI Suite (US EPA).

Una vez identificadas las diferentes partes y secciones de este interfaz procedemos a realizar una pequeña simulación. Lo primero que debemos hacer es seleccionar o introducir el componente químico sobre el cual estamos realizando los cálculos, para ello seleccionamos “Name Lookup” esta opción nos mostrará la siguiente ventana:

Chemical Name	CAS Number
CARBARYL	000063-25-2
2(5-CARBAMYL-PENTYL)-BENZOTRIAZOLE	069218-65-1
1(3-CARBAMYL-PROPYL)-BENZOTRIAZOLE	069218-58-2
2(3-CARBAMYL-PROPYL)-BENZOTRIAZOLE	069218-63-9
CARBANILIC ACID	000501-82-6
CARBANILIC ACID, CYCLOHEXYL ESTER	003770-95-4
CARBANILIC ACID, PHENYL ESTER	004930-03-4

Figura 5. Captura de pantalla selección de sustancia química a estudiar (US EPA).



En la lista que podemos observar en la parte superior (Figura 5) aparecen todos los componentes químicos para los cuales se han realizado una previa introducción de datos básicos en el programa por los creadores del mismo. Podemos seleccionar el que deseemos clicando en el botón “*Select Highlighted Chemical name*”.

Una vez seleccionado el elemento químico podemos observar como algunos de los campos en blanco se rellenan de manera automática (Figura 6). Para ciertos componentes químicos que aparecen en la base de datos o para aquellos que no aparezcan deberemos acabar de completar los campos que permanezcan en blanco.

Figura 6. Captura de pantalla interfaz después de seleccionar nuestro elemento de estudio (US EPA).

Una vez rellenos todos los campos, ya podemos pulsar el botón “*Calculate*” lo cual nos generará una pantalla con todos los resultados obtenidos por el software (Figura 7). Esta hoja nos permite viajar a través de las diferentes opciones y pestañas, visualizando desde un resumen de todos los datos hasta resultados concretos de manera individual. Podremos guardar estos resultados en un documento de *Notepad* donde podrán ser fácilmente consultados todas las veces que lo deseemos.

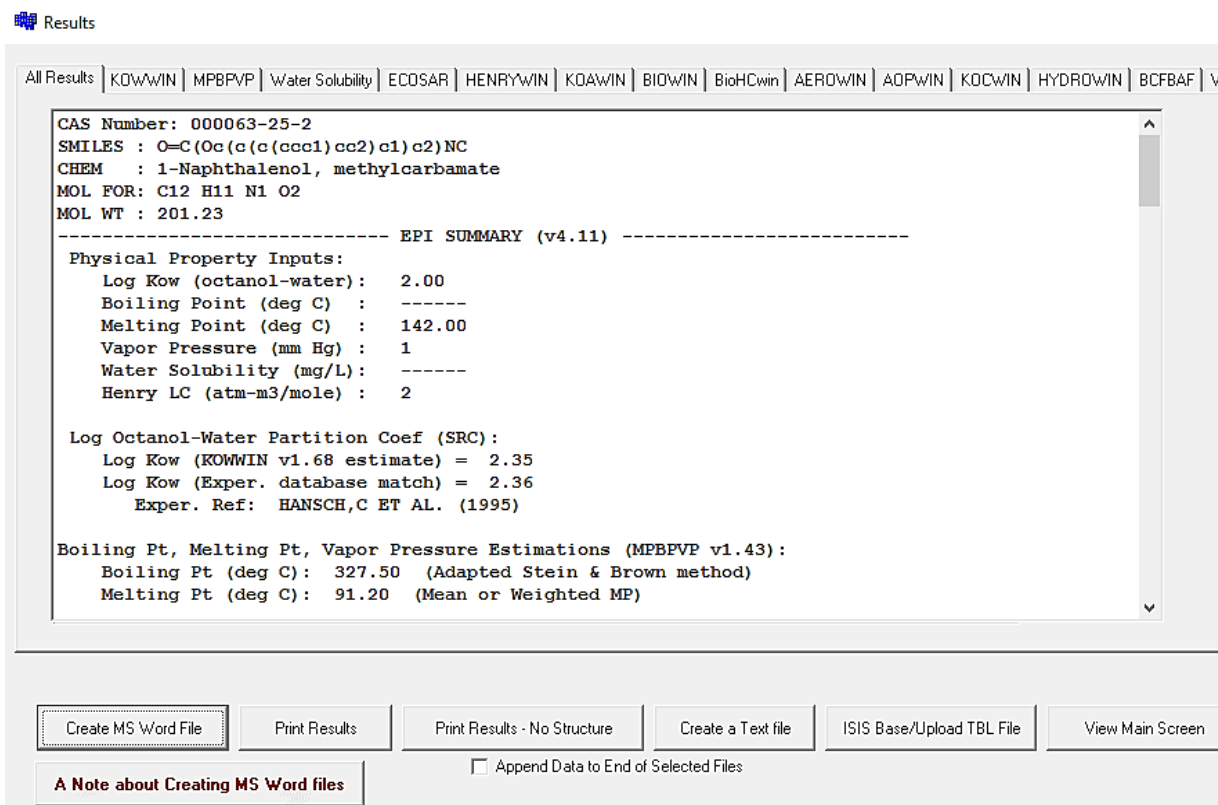


Figura 7. Informe generado por EPISuite sobre nuestra sustancia de estudio (US EPA).

Normalmente EPISuite se utiliza como una herramienta complementaria de programas como Mackay Level III, ya que, este software genera en un solo *click* gran cantidad de información sobre las características tanto químicas como físicas de cualquiera de los componentes contenidos en su base de datos esta información puede ser después introducida en software cuyo fin resulta más orientado hacia el desarrollo de una Evaluación de Impacto Ambiental.

Un ejemplo del uso de esta herramienta es el artículo “*Evaluación de impactos ambientales bióticos en la industria química mediante uso de software libre.*” (Gutiérrez-Martín et al. 2014) en el cual se estudia el procedimiento correcto a seguir para el desarrollo y cumplimentación de la evaluación de impacto ambiental en la síntesis de productos químicos. En dicho artículo se plantea el ejemplo de la síntesis de 1-naftil metilcarbamato comúnmente llamado carbaryl con el uso de EPISuite (Figura 8) para un cálculo básico de emisiones y descargas ambientales durante el proceso.

**EPI Suite - Welcome Screen**

Input CAS #: 000524-83-9  
 Input SMILES: O=C=NC  
 Input Chem Name: METHYLISOCYANATE

Henry LC: 3 atm/m<sup>3</sup>/mole  
 Melting Point: -45 Celsius  
 Boiling Point: 38.3 Celsius  
 Water Solubility: 348 mg/L  
 Vapor Pressure: 348 mm Hg  
 Log Kow: 1.67

Water Depth: 1 meters  
 Wind Velocity: 5 meters/sec  
 Current Velocity: 1 meters/sec  
 Molecular Weight: 57.05  
 Mol. For: C2 H3 N1 O1

**Level III Fugacity Model**

	Mass Amount (%)	Half Life (hours)	Emissions (kg/hr)
Air:	31	1.89e+003	1000
Water:	32.9	360	1000
Soil:	36	720	1000
Sediment:	0.114	3.24e+003	0

Persistence Time: 221 hrs  
 Log Kow (KOWWIN v. 1.67 estimate): 0.79  
 From Log Kow (WSKOW v1.411)  
 Water Solubility at 25 deg C (mg/L): 3.276e+004

Figura 8. Figura extraída de (Gutiérrez-Martín et al. 2014) información sobre el carbaryl generada por EPISuite (US EPA).

### 5.1.3. Análisis DAFO

Para completar el análisis del software en cuestión analizaremos sus puntos fuertes y débiles en comparación con otros programas del mercado como a nivel interno (Tabla 3).

Tabla 3. Tabla análisis DAFO software EPISuite.

	PUNTOS FUERTES	PUNTOS DÉBILES
<b>DE ORIGEN INTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Combinación de diferentes programas de cálculo en uno.</li> <li>Obtención de datos en formato manejable y comprensible.</li> <li>Utilización de software sencilla.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Posibilidad de estudiar únicamente componentes puros de manera independiente, no podemos estudiar mezclas.</li> <li>Carencias a la hora de estudiar componentes químicos que no aparezcan en las bases de datos del software.</li> <li>Posibilidad de estudiar un caso concreto cada vez, no de comparar dos escenarios diferentes.</li> </ul>
<b>DE ORIGEN EXTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Programa gratuito de fácil acceso para todo el mundo.</li> <li>Posibilidad de enviar informes de error a los desarrolladores.</li> <li>Posibilidad de expansión de la base de datos del software.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>No resulta una herramienta útil para EIA de manera independiente.</li> </ul>

## 5.2.- PROGRAMA EIA09

### 5.2.1. Información básica

<b>Nombre del programa:</b>	EIA09
<b>Desarrollador:</b>	Vicente Cruz Mínguez, Enrique Gallego Martín y Luis González de Paula
<b>Fuente:</b>	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID, FACULTAD DE INFORMÁTICA, SISTEMAS INFORMÁTICOS.
<b>Año:</b>	CURSO 2008/2009

#### **Descripción y características del programa:**

EIA09 es una aplicación open-source que facilita realización de proyectos de evaluación de impacto ambiental (EIA). Permite la definición de diferentes alternativas de realización del proyecto, en las cuales se indican y valoran los efectos/impactos ambientales según se considere apropiado, obteniendo distintas valoraciones globales, facilitando la elección de la alternativa más adecuada («EIA09 Project Page»).

**Este software se puede conseguir en:**

**EIA09**



Tabla 4. Tabla resumen EIA09.

Nombre	Fuente	Año	Versiones	Objetivo del programa	Subprogramas	Variables de entrada	Variables de salida
EIA09	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID, FACULTAD DE INFORMÁTICA, SISTEMAS INFORMÁTICOS	2008/2009	Solo existe una versión disponible de este software y es la versión original.	Ofrecer una herramienta que sea completa y útil para la realización de EIA en el caso de múltiples proyectos de ingeniería en formato libre para el uso por docentes. Es un software para uso docente pero que suple las carencias de su momento en muchas otras áreas como la profesional.	Java SE 6 (Sun Microsystems)	Acciones del proyecto	Valoración numérica de las diferentes alternativas.
					Jfreechart 1.0.11	Diferentes alternativas para un mismo proyecto.	
					Jasper Reports	Valoraciones alternativas	
						Factores a valorar	

El programa EIA09 presenta una característica novedosa en relación con los software de su época esta es la inclusión de elementos de interferencia mediante lógica borrosa, el tipo de valoraciones que se realiza en las diferentes metodologías de EIA poseen estructura borrosa (*fuzzy*). Esto se debe principalmente a que el tipo de estimaciones que realizamos a lo largo del proceso son mayoritariamente subjetivas (Minguez et al. [sin fecha]).

EIA09 está diseñado en bloques de la manera que podemos ver en la Figura 9.

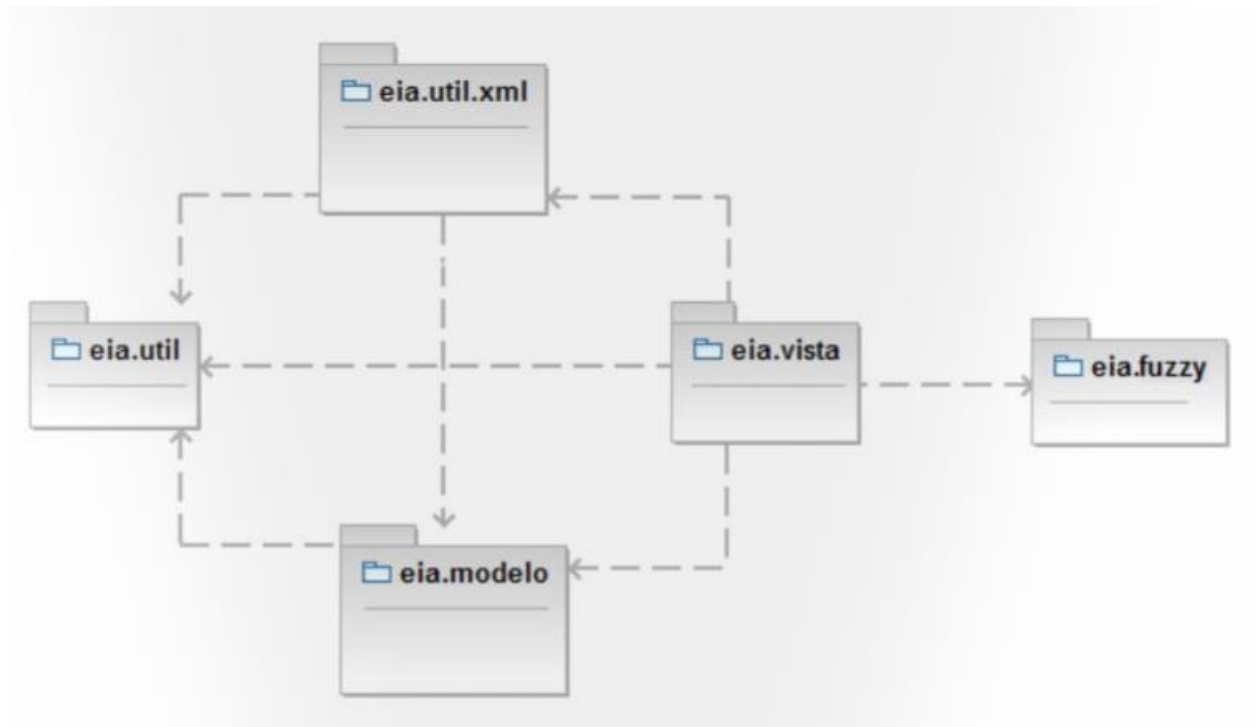
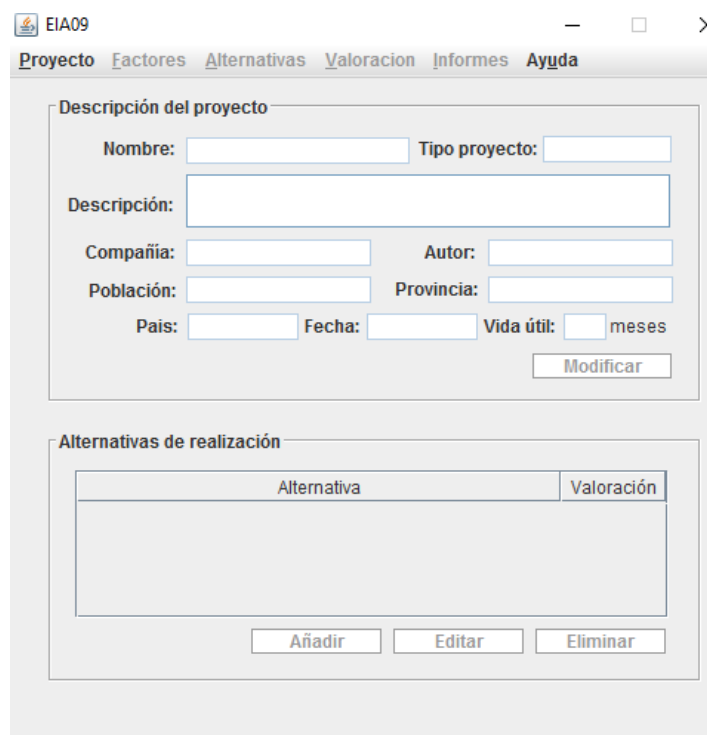


Figura 9. *Screenshot* diagrama implementación EIA09 del artículo (Minguez et al.) .

### 5.2.2. Interfaz y uso

En este apartado encontramos una pequeña demo del software EIA09 y una muestra de su apariencia. Nada más abrir este programa nos pide que creemos un proyecto nuevo y una pequeña descripción del mismo (Figura 10).



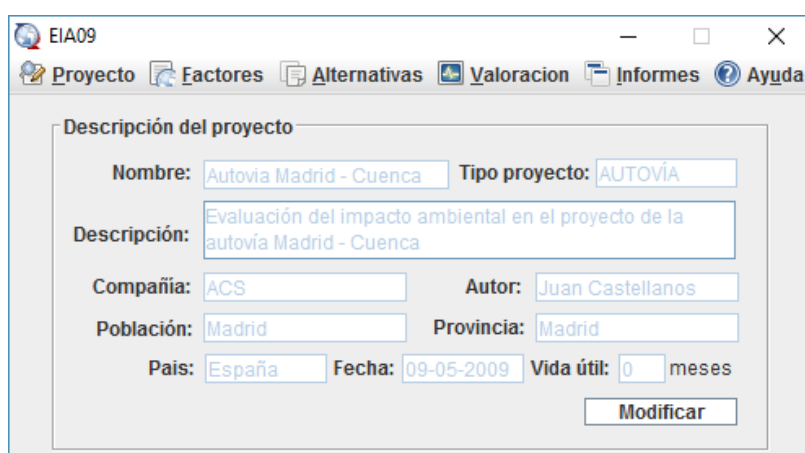
The screenshot shows the EIA09 software window with the 'Proyecto' tab selected. The 'Descripción del proyecto' section contains the following fields:

- Nombre: [Empty text box]
- Tipo proyecto: [Empty text box]
- Descripción: [Empty text box]
- Compañía: [Empty text box]
- Autor: [Empty text box]
- Población: [Empty text box]
- Provincia: [Empty text box]
- Pais: [Empty text box]
- Fecha: [Empty text box]
- Vida útil: [Empty text box] meses

A 'Modificar' button is located at the bottom right of the 'Descripción del proyecto' section. Below this section is the 'Alternativas de realización' section, which contains a table with two columns: 'Alternativa' and 'Valoración'. The table is currently empty. Below the table are three buttons: 'Añadir', 'Editar', and 'Eliminar'.

Figura 10. Pantalla principal EIA09(«EIA09 Project Page»).

Después de rellenar todos los datos identificativos de nuestro proyecto podemos proceder a añadir las diferentes alternativas (figura 11).



The screenshot shows the EIA09 software window with the 'Proyecto' tab selected. The 'Descripción del proyecto' section contains the following fields filled with data:

- Nombre: Autovia Madrid - Cuenca
- Tipo proyecto: AUTOVÍA
- Descripción: Evaluación del impacto ambiental en el proyecto de la autovía Madrid - Cuenca
- Compañía: ACS
- Autor: Juan Castellanos
- Población: Madrid
- Provincia: Madrid
- Pais: España
- Fecha: 09-05-2009
- Vida útil: 0 meses

A 'Modificar' button is located at the bottom right of the 'Descripción del proyecto' section. Below this section is the 'Alternativas de realización' section, which contains a table with two columns: 'Alternativa' and 'Valoración'. The table is currently empty. Below the table are three buttons: 'Añadir', 'Editar', and 'Eliminar'.

Figura 11. Pantalla introducción información básica del proyecto(«EIA09 Project Page»).

Un rasgo importante de este software es la pestaña de factores, en esta pestaña podemos encontrar diferentes opciones de importantes rasgos los cuales pueden ser afectados por el proyecto de construcción que se va a llevar a cabo. Se pueden modificar los valores adjudicados a cada factor de manera que seleccionamos que aspecto consideramos de más peso (por lo tanto, el de más importancia), estos valores son los que utiliza el programa para calcular los valores de valoración de las diferentes alternativas (Figura 12).

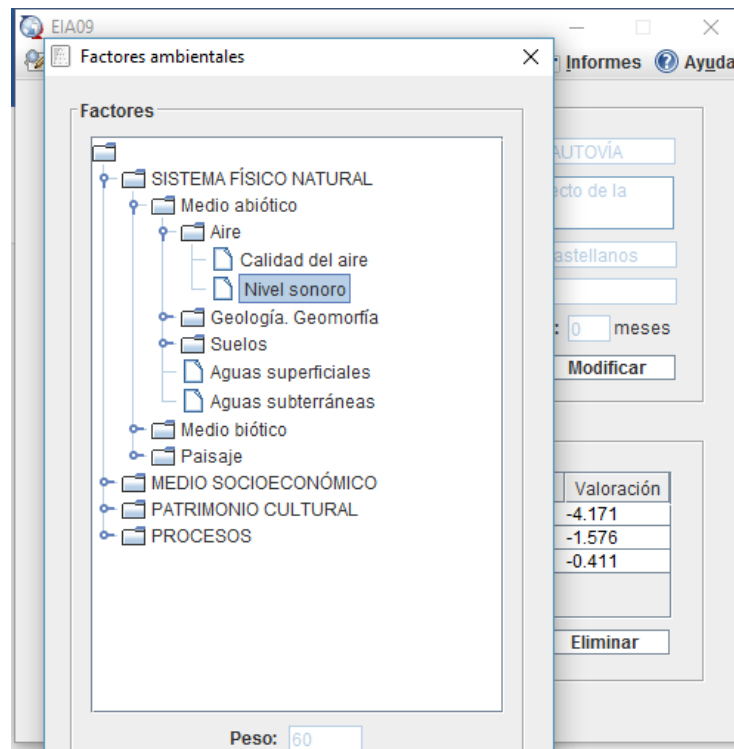


Figura 12. Lista de factores de impacto («EIA09 Project Page»).

En la pestaña de alternativas, como hemos comentado anteriormente podremos seleccionar y añadir todas las alternativas que deseemos. Estas alternativas las debemos diseñar y decidir nosotros previamente, el software solo las registrará y valorará según el peso de los factores que hemos añadido previamente (Figura 13).

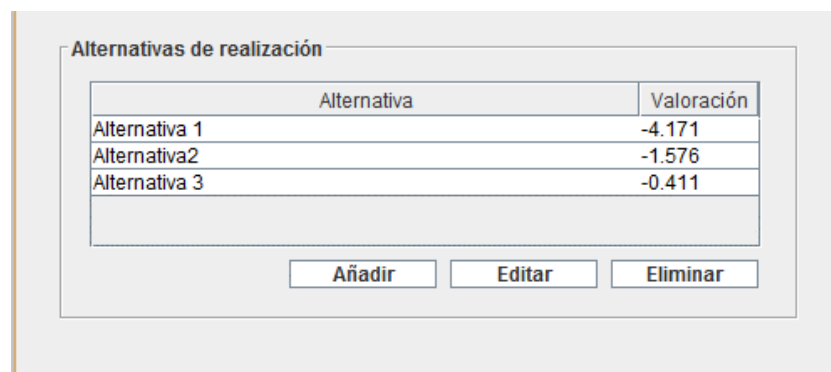


Figura 13. Listado diferentes alternativas («EIA09 Project Page»).



Según vamos añadiendo las diferentes alternativas se nos van registrando en la parte inferior de la pantalla. Al lado de cada alternativa nos aparece un valor el cual nos dará una idea del impacto medioambiental de la alternativa (impacto negativo, ya que, repercute de manera perjudicial o dañina en el medioambiente). Según avanzamos en el proceso podremos editar, añadir y eliminar estas alternativas en cualquier momento.

Si no sabemos interpretar los valores calculados por el programa tenemos la pestaña de valoración, la cual compara las tres opciones y nos devuelve un mensaje explícito de la mejor alternativa propuesta. En el caso de nuestro ejemplo la mejor alternativa sería la tercera (Figura 14).

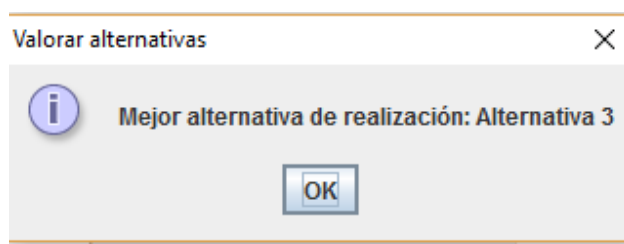


Figura 14. Mensaje de valoración de alternativas («EIA09 Project Page»).

Por último, podremos generar un informe en formato de texto (Figura 15) el cual podremos presentar y adjuntar al proyecto en cuestión, este informe es una descripción detallada de cada informe, una valoración y comparación de todas ellas y la elección de la mejor alternativa propuesta hasta el momento.

 <b>EIA09</b> <b>Evaluación de Impacto Ambiental</b>	
<b>Descripción del proyecto</b>	
<b>Nombre:</b> Autovía Madrid - Cuenca <b>Descripción:</b> Evaluación del impacto ambiental en el proyecto de la autovía Madrid - Cuenca <b>Compañía:</b> ACS <b>Población:</b> Madrid <b>País:</b> España	<b>Tipo:</b> AUTOVÍA <b>Autor:</b> Juan Castellanos <b>Provincia:</b> Madrid <b>Vida útil:</b> 0 meses
<b>Alternativas de realización</b>	
<b>Alternativa:</b> Alternativa 1	
<b>Valoración:</b> -4,171	
<b>Efectos ambientales</b>	
<b>Efecto sonoro</b>	
<b>Acción:</b> Emisión de ruido <b>Factor:</b> Nivel sonoro <b>Descripción:</b> Efecto sobre el ruido .	
<b>Valoración cualitativa</b>	
<b>Signo:</b> null	<b>Persistencia:</b> null
<b>Efecto:</b> null	<b>Reversibilidad:</b> null

Figura 15. Informe de alternativas («EIA09 Project Page»).

Este software incluye una pestaña de legislación donde podemos encontrar todas las leyes relacionadas y relevantes sobre el proyecto a llevar a cabo y mucho otros. Esta opción acaba de completar y facilitar el uso de este software.

### 5.2.3. Análisis DAFO

Tabla 5. Tabla análisis DAFO software EIA09.

	<b>PUNTOS FUERTES</b>	<b>PUNTOS DÉBILES</b>
<b>DE ORIGEN INTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Comparativa numérica de alternativas.</li> <li>• Utilización de software sencilla.</li> <li>• Programación muy completa y adecuada para la generación de EIA.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Este software no tiene base de datos propia, debemos incluir todo nosotros.</li> </ul>
<b>DE ORIGEN EXTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Programa gratuito de fácil acceso para todo el mundo.</li> <li>• Amplio abanico de situaciones en las que podemos utilizar este software.</li> </ul>	

### 5.3.- PROGRAMA TANKS.

#### 5.3.1. Información básica

**Nombre del programa:** TANKS Emissions Estimation Software, Versión 4.09D

**Desarrollador:** U.S. Environmental Protection Agency

**Fuente:** U.S. Environmental Protection Agency

**Año:** 2006

**Descripción y características del programa:**

TANKS es un programa informático basado en Windows que calcula las emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COV) y contaminantes peligrosos del aire (HAP) de los tanques de almacenamiento de techo fijo y flotante. TANKS se basa en los procedimientos de estimación de emisiones del Capítulo 7 de la Compilación de Factores de Emisión de Contaminantes Atmosféricos (AP-42) de la EPA. El manual del usuario, disponible en formato Adobe Acrobat y WordPerfect, explica las muchas características y opciones de TANKS. El programa incluye ayuda en línea para cada pantalla (US EPA, OAR, Office of Air Quality Planning and Standards).

**Este software se puede conseguir en:**

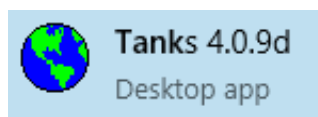


Tabla 6. Tabla resumen datos básicos TANKS.

Nombre	Fuente	Año	Versiones	Objetivo del programa	Variables de entrada	Variables de salida
TANKS Emissions Estimation Software	U.S. Environmental Protection Agency	2006	TANKS V.4.09D	Este programa tiene un objetivo muy concreto y bien acotado, trata las potenciales perdidas y fugas de componente orgánicos contenidos en tanques de diferentes tipos en instalaciones industriales.	Tipo de tanque/ contenedor.	Pérdidas permanentes.
					Características físicas del tanque.	Pérdidas de trabajo.
					Condiciones atmosféricas en las que está nuestro contenedor.	Pérdidas por montaje en cubierta o al aire libre.
					Substancia/as.	Pérdidas en el sello de la llanta.
					Contenido del contenedor cada mes	Pérdidas en la costura de la cubierta.

TANKS es una herramienta que se basa en las características específicas de cada sustancia de estudio para determinar y cuantificar fugas durante su almacenamiento en caso de que estas ocurran. También utiliza datos concretos del tipo de almacenamiento y del estado de las instalaciones donde la sustancia es almacenada.

- Pérdidas permanentes: Son aquellas que ocurren independientemente del estado del contenedor, sustancia o condiciones atmosféricas y de manera irreversible.
- Pérdidas de trabajo: Son aquellas que ocurren debido al trabajo o uso del tanque.
- Pérdidas por montaje en cubierta o al aire libre: Son aquella que ocurren en tanques que están expuesto de manera directa a las condiciones atmosféricas.
- Pérdidas en el sello de la llanta: Son aquellas localizadas entre el conducto de entrada o/y salida del contenedor y la tapa del mismo.
- Pérdidas en la costura de la cubierta: Son aquella localizadas en los puntos de unión de la chapa del recipiente contenedor.

### 5. 3.2. Interfaz y uso

En la siguiente Figura podemos observar el interfaz que presenta este software de control de emisiones de productos orgánicos almacenados en tanques (Figura 16)

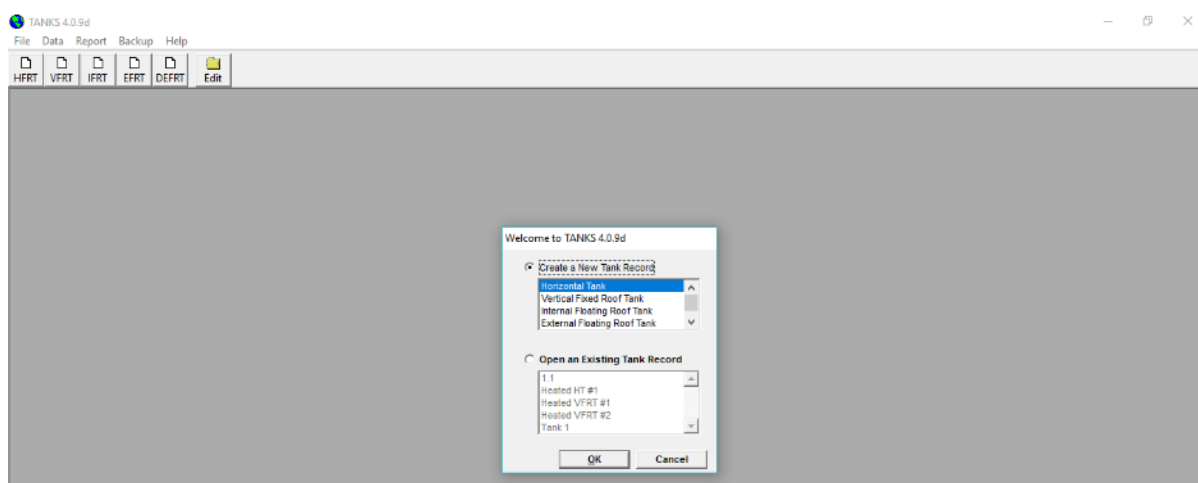


Figura 16. Pantalla principal del programa TANKS (US EPA, OAR).

En la parte superior podemos encontrar la barra de herramientas además de *shortcuts* (Figura 17) para cada una de las diferentes posibilidades respecto al tipo de tanque y su localización en este programa.

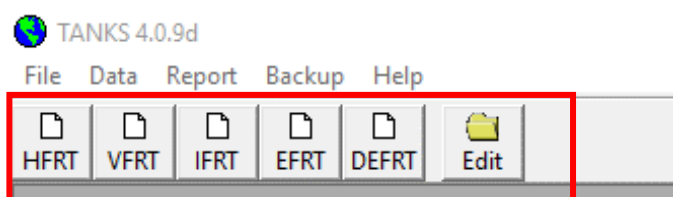


Figura 17. Menú simplificado para selección de tanques (US EPA, OAR).

En la parte central de la pantalla se nos abre una pestaña adicional donde debemos seleccionar una de las dos posibles opciones, crear un proyecto nuevo o editar uno creado previamente (Figura 18).

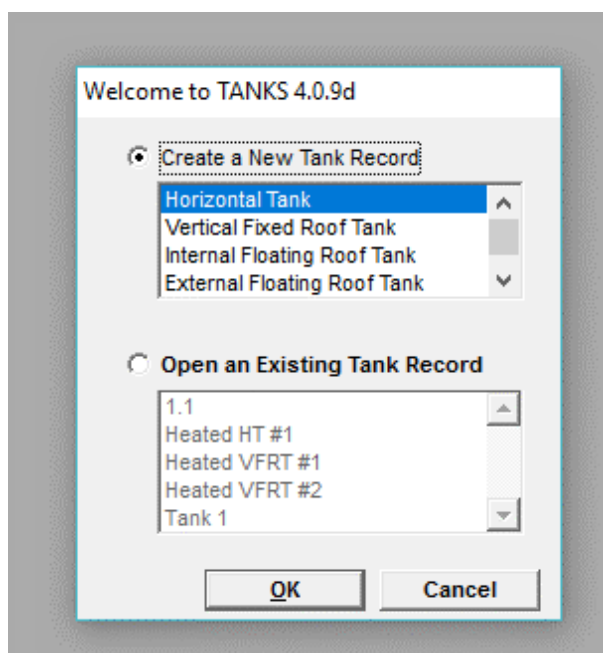


Figura 18. Menú principal del programa (US EPA, OAR).

Cuando seleccionamos la opción de crear un nuevo proyecto debemos elegir el tipo de tanque sobre el cual queremos hacer el estudio una vez lo seleccionamos y pulsamos **OK** nos aparece la siguiente pantalla (Figura 19):

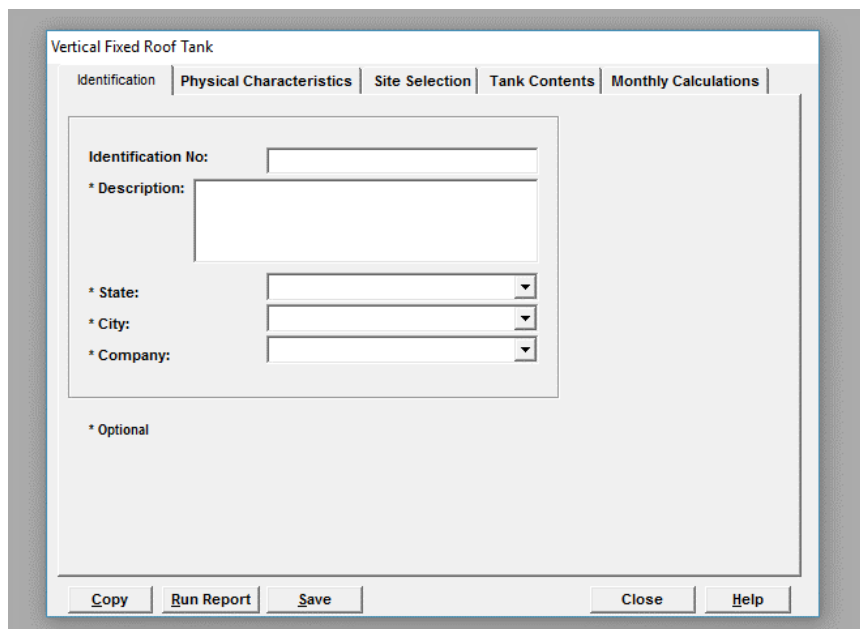


Figura 19. Menú principal del programa (US EPA, OAR).

Esta ventana tiene 5 pestañas diferentes

1. Identification:

En esta primera ventana podremos ponerle un nombre a nuestro proyecto, identificarlo dentro de nuestros archivos y guárdalo para posterior uso.

2. Physical Characteristics:

Nos piden definir la geometría y otras características físicas de nuestro tanque contenedor (Figura 20).

The screenshot shows a software window titled "Vertical Fixed Roof Tank" with five tabs: "Identification", "Physical Characteristics" (selected), "Site Selection", "Tank Contents", and "Monthly Calculations". The "Physical Characteristics" tab contains several input fields organized into four sections:

- Dimensions:**
  - Shell Height (ft): 0
  - Shell Diameter (ft): 0
  - Maximum Liquid Height (ft): 0
  - Average Liquid Height (ft): 0
  - Working Volume (gal): 0,00
  - Turnovers per Year: 0,00
  - Net Throughput (gal/yr): 0,00
  - Is Tank Heated?: No
- Roof Characteristics:**
  - Color/Shade: [dropdown]
  - Condition: [dropdown]
  - Type: [dropdown]
  - Height (ft): 0
- Shell Characteristics:**
  - Shell Color/Shade: [dropdown]
  - Shell Condition: [dropdown]
- Breather Vent Settings:**
  - Vacuum Setting (psig): -0,03
  - Pressure Setting (psig): 0,03

At the bottom of the window are five buttons: "Copy", "Run Report", "Save", "Close", and "Help".

Figura 20. Pestaña "Physical characteristics" (US EPA, OAR).

3. Site selection:

Definir el lugar donde vamos a situar dicho contenedor y las condiciones meteorológicas a las que va a estar expuesto (Figura 21).

Vertical Fixed Roof Tank

Identification | Physical Characteristics | **Site Selection** | Tank Contents | Monthly Calculations

Nearest Major City:

Daily Average Ambient Temperature (F):

Annual Average Maximum Temperature (F):

Annual Average Minimum Temperature (F):

Average Wind Speed (mph):

Annual Average Solar Insulation Factor (Btu/(ft²\*day)):

Atmospheric Pressure (psia):

Sort by State Name

Copy Run Report Save Close Help

Figura 21. Pestaña “Site selection” (US EPA, OAR).

4. Tank contents:

En este apartado definiremos si nuestro tanque contendrá mezclas o componentes simples, y cuáles serán estos (Figura 22).

Vertical Fixed Roof Tank

Identification | Physical Characteristics | Site Selection | **Tank Contents** | Monthly Calculations

Chemical Category of Liquid:

Single or Multi-Component Liquid:

Calculate Mixture Properties

Delete Mixture

Next Mixture >

< Previous Mixture

Add Mixture

Mixture 1 of 1

Copy Run Report Save Close Help

Figura 22. Pestaña “Tank contents” (US EPA, OAR).



## 5. Monthly calculations:

Esta pestaña nos ofrece la posibilidad de realizar cálculos en base al volumen que guardamos y el componente o mezcla al que se refiere, es decir, podremos obtener cálculos si guardamos diferentes componentes o diferentes volúmenes del mismo componente en nuestro tanque a lo largo de un año (Figura 23).

The screenshot displays the 'Monthly Calculations' tab within the 'Vertical Fixed Roof Tank' application. The interface includes a table for monthly data and summary boxes for annual and monthly totals.

	Throughput	Mixture Name
JAN: <input type="checkbox"/>	0,00	
FEB: <input type="checkbox"/>	0,00	
MAR: <input type="checkbox"/>	0,00	
APR: <input type="checkbox"/>	0,00	
MAY: <input type="checkbox"/>	0,00	
JUN: <input type="checkbox"/>	0,00	
JUL: <input type="checkbox"/>	0,00	
AUG: <input type="checkbox"/>	0,00	
SEP: <input type="checkbox"/>	0,00	
OCT: <input type="checkbox"/>	0,00	
NOV: <input type="checkbox"/>	0,00	
DEC: <input type="checkbox"/>	0,00	

Summary boxes on the right:

- Annual Throughput Specified: 0,00
- Total for Months: 0,00
- Fill Mixture Names With First Mixture Name
- Distribute Throughput

Buttons at the bottom: Copy, Run Report, Save, Close, Help.

Figura 23. Pestaña “Monthly calculations” (US EPA, OAR).

Una vez introducidos todos los datos necesarios y de nuestra conveniencia pulsamos el botón *Run Report* y nos aparece la siguiente pantalla (Figura 24):

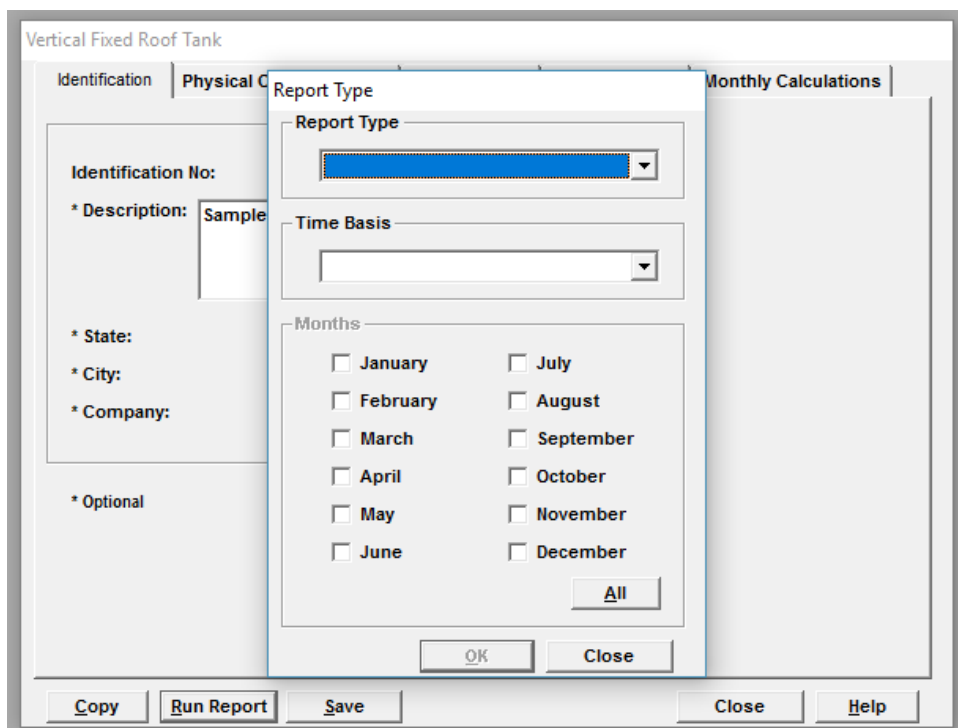


Figura 24. *Generación de Reports (US EPA, OAR).*

En esta ventana podremos seleccionar el formato de nuestro estudio/evaluación. Y se genera automáticamente una hoja de Excel que contiene toda la información calculada a partir de los datos iniciales introducidos por el usuario.

### 5.3.3. Análisis DAFO

Tabla 7. Tabla análisis DAFO software TANKS.

	PUNTOS FUERTES	PUNTOS DÉBILES
<b>DE ORIGEN INTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Estudio de situaciones bien acotadas.</li> <li>• Obtención de datos en formato manejable y comprensible.</li> <li>• Utilización de software sencilla.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Solo es útil en el caso de compuestos orgánicos.</li> <li>• No es capaz de hacer estimaciones que consideren condiciones de temperatura.</li> </ul>
<b>DE ORIGEN EXTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Función específica no incluida en ningún otro software de este tipo.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Propósito de este programa demasiado concreto.</li> </ul>

## 5.4.- PROGRAMA BEES.

### 5.4.1. Información básica

**Nombre del programa:** BEES

**Desarrollador:** NIST (National Institute of Standards and Technology) (United States of America) Engineering Laboratory

**Fuente:** NIST (National Institute of Standards and Technology) Engineering Laboratory

**Año:** Mayo 2009

#### **Descripción y características del programa:**

BEES mide el rendimiento medioambiental de los productos de construcción utilizando el enfoque de evaluación del ciclo de vida especificado en la serie de normas ISO 14040. Se analizan todas las etapas de la vida de un producto: adquisición de materias primas, fabricación, transporte, instalación, uso y reciclaje y gestión de residuos. El desempeño económico se mide utilizando el método estándar de costo de ciclo de vida de la ASTM, que cubre los costos de inversión inicial, reemplazo, operación, mantenimiento y reparación, y eliminación. El desempeño ambiental y económico se combinan en una medida de desempeño global utilizando el estándar ASTM para el análisis de decisiones de múltiples atributos. Para el análisis completo de BEES, los productos de construcción se definen y clasifican de acuerdo con la clasificación estándar ASTM para elementos de construcción conocidos como UNIFORMAT II («BEES»).

**Este software se puede conseguir en:**



Tabla 8. Tabla resumen datos básicos BEES.

Nombre	Fuente	Año	Versiones	Objetivo del programa	Subprogramas	Variables de entrada	Variables de salida
<b>BEES</b>	NIST (National Institute of Standards and Technology) Engineering Laboratory	2009	Solo existe una versión de este software ya que es una página web está en continuo desarrollo. (Última actualización diciembre de 2016)	Cuantificar el impacto ambiental durante el ciclo de vida de diferentes elementos de construcción o mobiliario.		Elegir el grupo del elemento a estudiar	Coefficiente numérico en millas para cada alternativa, para posterior valoración.
						Subgrupo del elemento.	
						Elemento de estudio	
						Selección de diferentes alternativas.	
						Elegir el grupo del elemento a estudiar	

Este programa se basa en la normativa ISO 14040 para realizar una evaluación del ciclo de vida completo del material de construcción en estudio. BEES analiza desde la materia prima, su extracción y transformación hasta el transporte e implantación y por fin cuando entra en desuso, reciclaje... de esta manera consigue una puntuación numérica que se acerca de muchas maneras a como este producto respecta el medioambiente.

Esta evaluación medioambiental se combina con una evaluación de costes de remplazamiento, inversión inicial, mantenimiento, reciclaje, etc. Para el cálculo de estos costes se utilizan los estándares ASTM. ASTM ES...

BEES utiliza también ASTM para clasificar y definir los productos de construcción.

En la siguiente figura (Figura 25) se puede entender un poco mejor la clasificación y asignación de puntos que realiza el programa BEES de forma interna.

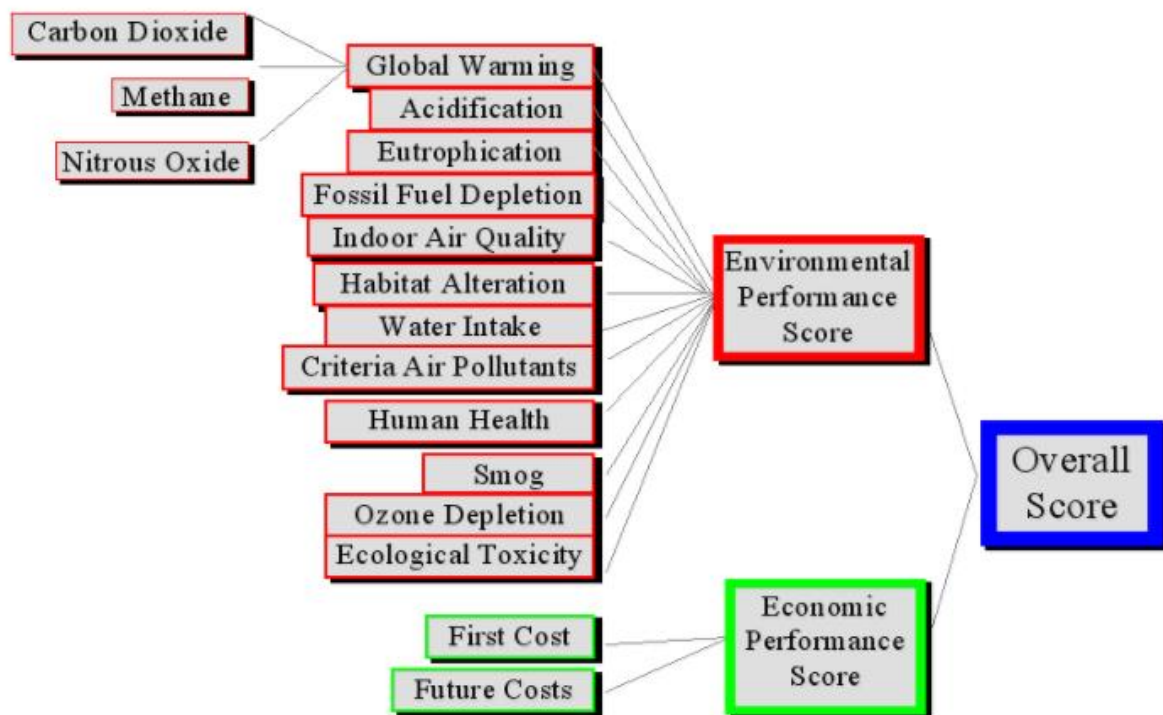
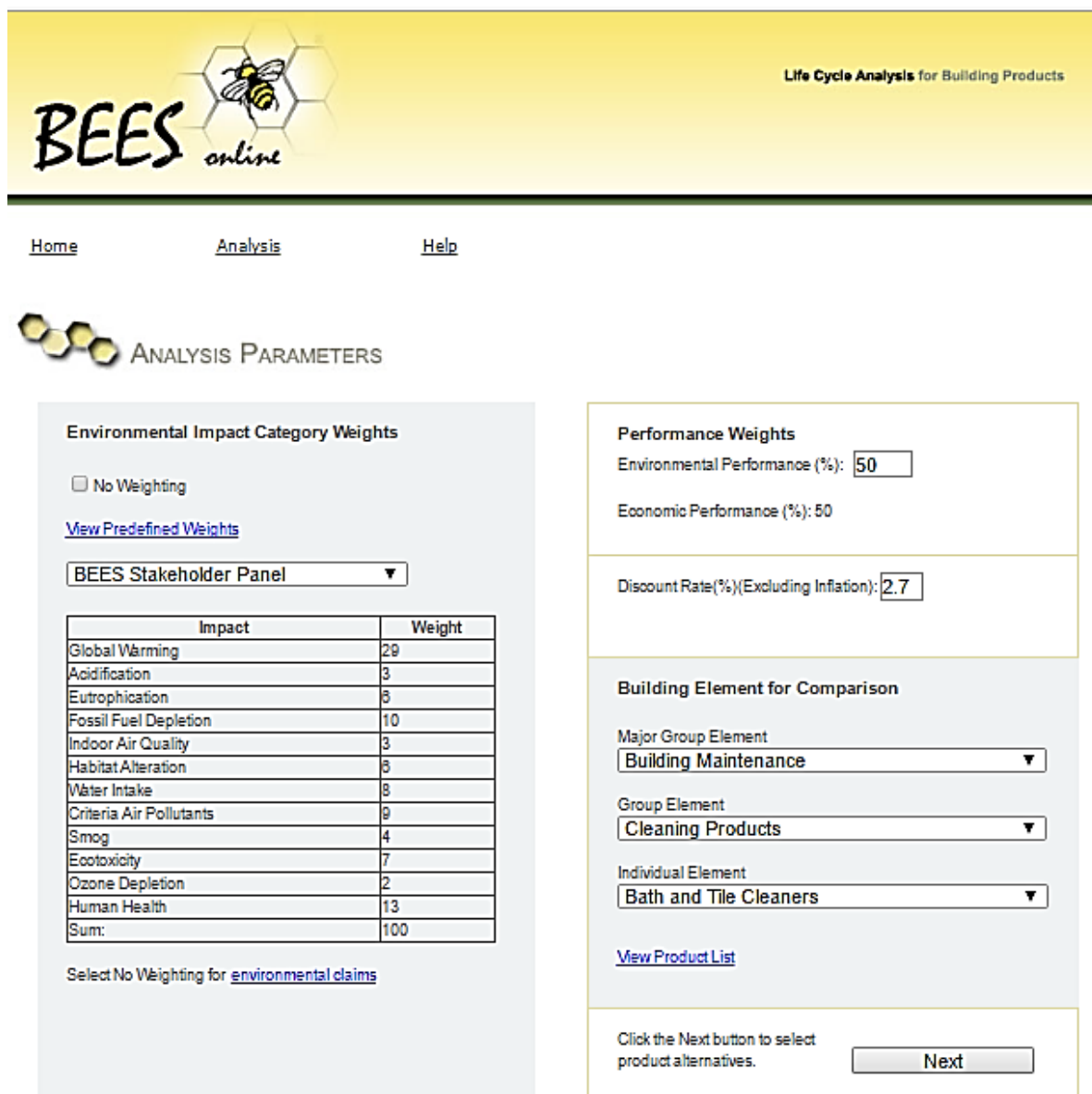


Figura 25. Diagrama de flujo, imagen extraída de la página web BEES («BEES»).

### 5.4.2. Interfaz y uso

Cuando accedemos a la página de BEES NIST lo primero que encontramos es una página principal con dos opciones ir al programa de cálculo o ver una demo, si seleccionamos acceso al software nos aparecerá la siguiente ventana (Figura 26):



The screenshot shows the BEES online interface. At the top, there is a header with the BEES logo and the text "Life Cycle Analysis for Building Products". Below the header, there are navigation links: Home, Analysis, and Help. The main section is titled "ANALYSIS PARAMETERS". It is divided into two main panels. The left panel is titled "Environmental Impact Category Weights" and contains a checkbox for "No Weighting", a link to "View Predefined Weights", and a dropdown menu for "BEES Stakeholder Panel". Below this is a table with two columns: "Impact" and "Weight". The right panel is titled "Performance Weights" and contains input fields for "Environmental Performance (%)", "Economic Performance (%)", and "Discount Rate(%) (Excluding Inflation)". Below this is a section titled "Building Element for Comparison" with dropdown menus for "Major Group Element", "Group Element", and "Individual Element". At the bottom, there is a "Next" button and a link to "View Product List".

BEES online

Life Cycle Analysis for Building Products

Home Analysis Help

ANALYSIS PARAMETERS

Environmental Impact Category Weights

☐ No Weighting

[View Predefined Weights](#)

BEES Stakeholder Panel ▼

Impact	Weight
Global Warming	29
Acidification	3
Eutrophication	3
Fossil Fuel Depletion	10
Indoor Air Quality	3
Habitat Alteration	3
Water Intake	3
Criteria Air Pollutants	9
Smog	4
Ecotoxicity	7
Ozone Depletion	2
Human Health	13
Sum:	100

Select No Weighting for [environmental claims](#)

Performance Weights

Environmental Performance (%): 50

Economic Performance (%): 50

Discount Rate(%) (Excluding Inflation): 2.7

Building Element for Comparison

Major Group Element  
Building Maintenance ▼

Group Element  
Cleaning Products ▼

Individual Element  
Bath and Tile Cleaners ▼

[View Product List](#)

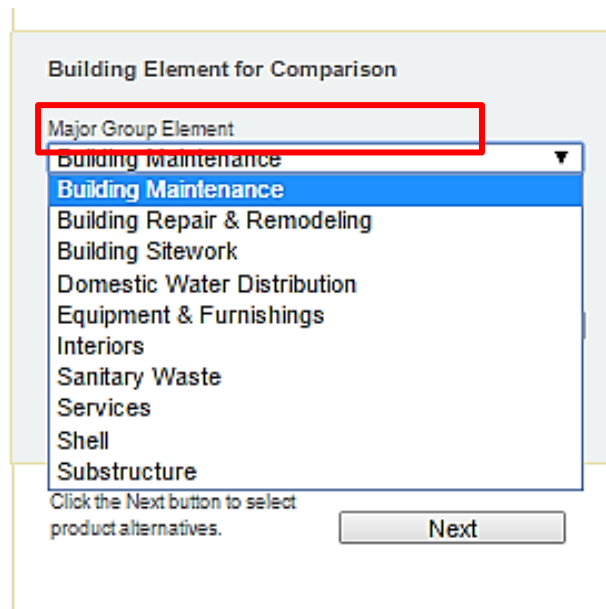
Click the Next button to select product alternatives.

Next

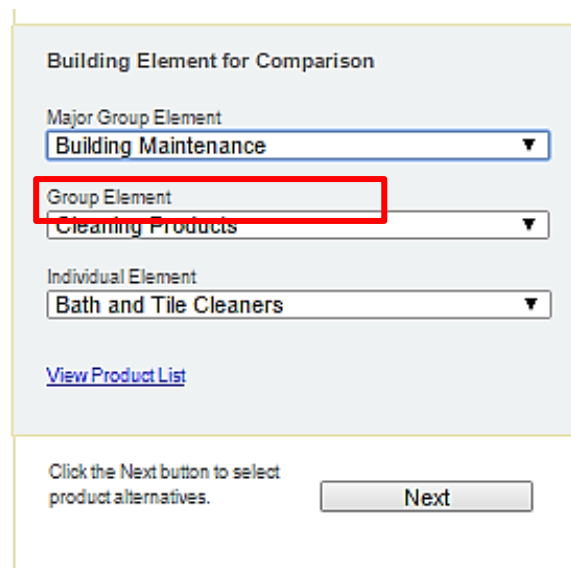
Figura 26. Página web BEES («BEES»).

Tenemos la pantalla dividida en dos partes en la derecha encontramos una Tabla donde podemos elegir el peso de cada uno de los factores determinantes a la hora de elegir un material de construcción, decoración... Podemos elegir los predeterminados, decidir nuevos valores o escoger la opción sin valores de peso.

En el lado derecho de la pantalla encontramos tres pestañas desplegables en las cuales podremos elegir el grupo al que pertenece nuestro elemento de estudio *Figura 27* (mantenimiento, distribución de agua doméstica, interiores...) en las siguientes dos opciones elegiremos el subgrupo del elemento *Figura 28* y por último nuestro elemento de estudio *Figura 29*.



*Figura 27. Major group element («BEES»).*



*Figura 28. Group element («BEES»).*

Building Element for Comparison

Major Group Element  
 Building Maintenance ▼

Group Element  
 Cleaning Products ▼

Individual Element  
 Bath and Tile Cleaners ▼

[View Product List](#)

Click the Next button to select product alternatives.


Next

Figura 29. Individual element («BEES»).

Una vez hayamos seleccionado nuestro elemento de estudio nos aparecerá una lista con diferentes alternativas, las cuales están previamente introducidas en el software de cálculo por los desarrolladores. Podemos elegir todas las que deseemos y añadirlas a nuestra lista (Figura 30).

**BEES online** Life Cycle Analysis for Building Products

[Home](#) [Analysis](#) [Help](#)

 SELECT ALTERNATIVES


Select Product Alternatives Update Product Details

Spartan Green Solutions Restrm Cleaner ▲

Figura 30. Alternativas sugeridas por BEES para el elemento seleccionado («BEES»).

Cuando seleccionamos una opción aparece un valor a la derecha de la pantalla y el botón de selección de la alternativa deseada (Figura 31).





## SELECT ALTERNATIVES

Select Product Alternatives

Spartan Green Solutions Restrm Cleaner

Update Product Details

[View Product Data](#)


Spartan Green Solutions Restrm Cleaner

Transportation distance from manufacture to use:  miles

kilometers

Figura 31. Valor en millas por la alternativa en cuestión («BEES»).

Nos aparecerán todas las alternativas deseadas en la parte inferior de la pantalla junto con el valor calculado por el software de manera que podemos compararlas entre ellas (Figura 32).



## SELECT ALTERNATIVES

Select Product Alternatives

Spartan Green Solutions Restrm Cleaner

Update Product Details

[View Product Data](#)

Spartan Green Solutions Restrm Cleaner

Transportation distance from manufacture to use:  miles

kilometers

	Product	Distance (miles)
<a href="#">Delete</a>	Spartan Green Solutions Restrm Cleaner	750

Figura 32. Tabla comparativa autogenerada por el software («BEES»).

Basándonos en los valores de distancia y en diferentes gráficos que nos ofrece el programa podremos elegir cual es el material más adecuado, este software está específicamente desarrollado para EEUU por lo que los estados y distancias están referidos a este país en concreto. Con el sistema de valoración por millas encontramos alternativas más próximas a nuestra industria y además de ahorrar dinero y minimizar el impacto medioambiental promueve el mercado local.

#### 5.4.3. Análisis DAFO

Tabla 9. Tabla análisis DAFO software TANKS.

	<b>PUNTOS FUERTES</b>	<b>PUNTOS DÉBILES</b>
<b>DE ORIGEN INTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Estudio de situaciones bien acotadas.</li> <li>• No hace falta previa instalación para utilizar el software.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Necesita conexión a internet para su uso.</li> <li>• Valor de peso de cada factor aleatorio.</li> </ul>
<b>DE ORIGEN EXTERNO</b>		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Programa diseñado para impacto ambiental de construcciones, no serviría para la actividad de una industria química, aunque podría utilizarse para el impacto de la construcción de sus instalaciones.</li> </ul>

## 5.5.- PROGRAMA Mackay Level III.

### 5.5.1. Información básica

<b>Nombre del programa:</b>	Mackay Level III
<b>Desarrollador:</b>	The Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry
<b>Fuente:</b>	The Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry
<b>Año:</b>	2003

#### **Descripción y características del programa:**

Este programa tiene como objetivo una descripción más detallada del destino final de un producto químico durante una reacción, esto significa tener en cuenta las pérdidas por degradación, por procesos de transporte intermedios y también de advección.

Es un programa mejorada desde la versión Level II que a diferencia del modelo de Nivel II, no se asume el equilibrio entre los medios y, en general, cada medio tiene una fugacidad diferente («CEMC - Level III Model»).

**Este software se puede conseguir en:**

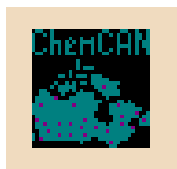


Tabla 10. Tabla resumen dato básicos Mackay Level III.

Nombre	Fuente	Año	Versiones	Objetivo del programa	Variables de entrada	Variables de salida
Mackay Level III	The Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry	1999	Ver.2.80	Cálculo de emisiones completa de una reacción o procesos química incluyendo reacciones secundarias, perdidas por transporte intermedio y liberaciones no controladas.	Propiedades químicas	Coeficientes de partición (Tipo 1)
					Emisiones	Valores Z
			Ver.2.70		Propiedades medioambientales.	Fugacidad de cada medio
			Ver.2.65			Tasas de transporte intermedia y valores D
						Reacción y advección, valores y tasas de pérdida
					Ver.2.20	
						Concentraciones y cantidades para cada medio
			Ver2.10			
						Gráficos de resultados clave

Una simulación de nivel III describe una situación que es un paso más complejo y realista que el modelo de nivel II. Al igual que el modelo de Nivel II, el producto químico se descarga continuamente a una velocidad constante y alcanza una condición de estado estacionario en la que las tasas de entrada y salida son iguales. Los procesos de pérdida son reacciones degradantes y advección. A diferencia del modelo de Nivel II, no se asume el equilibrio entre los medios y, en general, cada medio tiene una fugacidad diferente como hemos dicho antes. Un balance de masa se aplica no sólo al sistema como un todo, sino a cada elemento de manera independiente. Las tasas de transporte intermedia se calculan usando los valores de D que contienen información sobre coeficientes de transferencia de masa, áreas, tasas de deposición y re-suspensión, tasas de difusión y tasas de filtración del suelo. Este programa requiere que se defina de manera independiente y concreta cada medio por separado a diferencia del Nivel II en el cual definíamos un medio general.

El software calcula los balances de masas para todos los medios involucrados y los interrelaciona en la medida de lo posible de la manera más realista posible.

Este software trata tres familias de productos químicos:

- Tipo 1: Se dispersan en todos los medios.
- Tipo 2: Productos químicos no volátiles.
- Tipo 3: Productos químicos con solubilidad en agua cercana o igual a cero.

El modelo de nivel III asume un entorno simple y evaluativo con volúmenes y densidades definidas por el usuario para los siguientes medios (o compartimentos) homogéneos: aire, agua, suelo, sedimento, sedimentos suspendidos, peces y aerosoles.

El software calcula tres tipos de índices de permanencia en el medio:

- Valor global, de persistencia, TO.
- Valor individual de persistencia para la reacción, TR.
- Valor persistencia por advección, TA.

Se pueden calcular los índices a partir de los otros dos sabiendo que existe una relación entre ellos, ya que,  $1 / TO$  es igual a la suma de  $1 / TR$  y  $1 / TA$ .

Este software nos devuelve una serie de variables, a continuación, las definimos brevemente:

- Coeficientes de partición (Tipo 1): Si consideramos una sustancia que es capaz de disolverse en dos solventes que no se pueden mezclar entre sí, la relación entre las concentraciones de esta sustancia en los distintos solventes es el llamado coeficiente de reparto. Este coeficiente es constante para una determinada temperatura («Coeficiente de reparto | La Guía de Química»).

- Valores Z: El Número Atómico (Z) corresponde al número de protones (p+) que posee un átomo en su núcleo (TP-Laboratorio Químico 2017)
- Fugacidad de cada medio: Es la valoración de cuánto se aleja del comportamiento ideal una sustancia en un determinado medio («Fugacidad y Actividad by Federico Salazar - issuu»).
- Tasas de transporte intermedia y valores D: La tasa de transporte intermedia es un valor que indica la velocidad a la que una sustancia viaja de un medio a otro y los valores D son los coeficientes de dispersión de la misma en cada uno de los medios
- Reacción y advección, valores y tasas de pérdida: Disposición de la sustancia a reaccionar con el medio y la disposición de la sustancia en estado sólido a transportarse a aguas subterráneas («CAPÍTULO 4: TRANSPORTE DE SUSTANCIAS INERTES Y REACTIVOS CAPÍTULO 4 TRANSPORTE DE SUSTANCIAS INERTES Y REACTIVOS»)
- Tiempos de residencia o persistencia: Es el tiempo requerido para que un determinado material complete su ciclo de ingreso, permanencia y egreso en un medio permeable («Tiempo de residencia»).
- Concentraciones y cantidades para cada medio: Cantidad de sustancia contenida en una unidad de medio.
- Un diagrama de resumen: Compilación esquemática de resultados.
- Gráficos de resultados clave: Representación esquemática de los resultados más importantes obtenidos por el software.

### 5.5.2. Interfaz y uso

Cuando abrimos el programa nos aparece la pantalla principal con todos los pasos y diferentes opciones que este software nos ofrece (Figura 33).

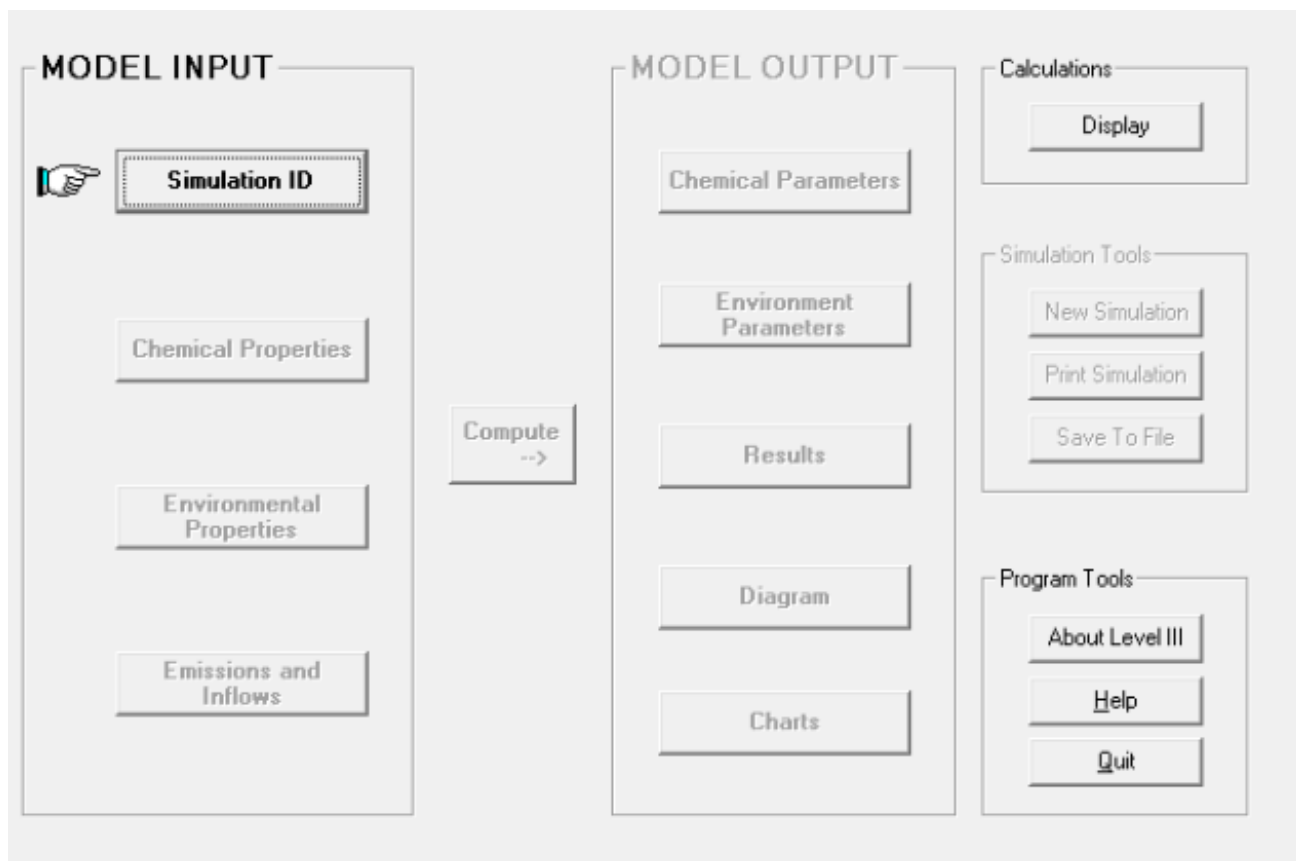


Figura 33. Pantalla principal programa Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

Lo primero que debemos hacer es guardar nuestra simulación para poder registrar y consultarla una vez hayamos terminado con el estudio ambiental (Figura 34).

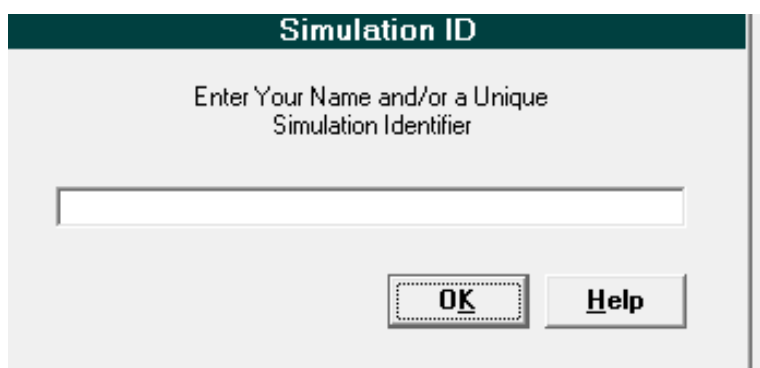


Figura 34. Pantalla nombre del proyecto («CEMC - Level III Model»).

Este software requiere que introduzcamos una serie de datos sobre nuestro elemento químico para poder hacer los cálculos pertinentes (Figura 35), podemos elegir uno de los compuestos químicos que tiene incluida la base de datos del software o introducir un compuesto químicos nuevo.

**Chemical Properties**

Chemical Name:

Type of Chemical: 1

Molar Mass (g/mol):

Data Temperature (°C):

**Reaction Half-Lives (h)**

Air (gaseous)	<input type="text" value="170"/>	<input type="checkbox"/> Negligible
Water (no sus. part.)	<input type="text" value="1700"/>	<input type="checkbox"/> Negligible
Soil	<input type="text" value="17000"/>	<input type="checkbox"/> Negligible
Sediment	<input type="text" value="55000"/>	<input type="checkbox"/> Negligible
Suspended Particles	<input type="text" value="1700"/>	<input type="checkbox"/> Negligible
Fish	<input type="text" value="1700"/>	<input type="checkbox"/> Negligible
Aerosol	<input type="text" value="170"/>	<input type="checkbox"/> Negligible

**Data for Type 1**

Henry's Law Constant (Pa.m<sup>3</sup>/mol):

Water Solubility (g/m<sup>3</sup>):

Vapour Pressure (Pa):

Log Kow:

Melting Point (°C):

**Database Operations**

Figura 35. Pantalla propiedades químicas («CEMC - Level III Model»).

El siguiente paso será definir nuestros diferentes medios, como ya se ha mencionado Mackay Level III considera cada medio de forma independiente para obtener resultados lo más realistas posibles, por eso, debemos primero introducir una serie de datos básicos y concretos para cada medio en el que nuestro compuesto o derivados pueda dispersarse.



**Environmental Properties**

Environment Name: Default Environment New Enviroment

---

**Dimensions**

**Volumes (m³)**

	Area (m²)	Depth (m)
Air	2,98E+11	2000
Water	1,27E+10	20
Soil	1,00	0,1
Sediment	1,00	0,01

**Volume Fractions**

Air: Aerosol 2E-11

Water: Sus. Particles 0,000005 Fish 0,000001

Soil: Air 0,2 Water 0,3 Solids 0,5

Sediment: Water 0,8 Solids 0,2

---

**Database Operations**

Save
Delete

OK
Cancel
Help

Figura 36. Pantalla propiedades medioambiente(«CEMC - Level III Model»).

Por último, podremos introducir las emisiones que se observan a cada uno de los medios (atmósfera, hidrosfera, sedimentos y litosfera) también se nos pedirá la concentración del aire y el agua que contienen de este compuesto en estudio. Estos valores sirven para calcular los balances de masa para cada medio y algunos de los factores necesarios para el cálculo de los índices de emisión o dispersión.

**Emissions and Inflows**

**Emission Rate (kg/h)**

Into Air	0
Into Water	0
Into Soil	0
Into Sediment	0

**Advective Inflow Concentrations**

Concentration in Air (ng/m³)	0
Concentration in Water (ng/L)	0

**Default Values** **OK** **Cancel** **Help**

Figura 37. Pantalla de emisiones y afluentes («CEMC - Level III Model»).

Una vez completados todos los campos que creamos oportunos para las emisiones del compuesto apretamos “Compute” y el software nos ofrece un diagrama completo de descargas (Figura 38) donde podemos observar cómo se distribuyen las emisiones de la sustancia, el tiempo de residencia, la vida media, etc.

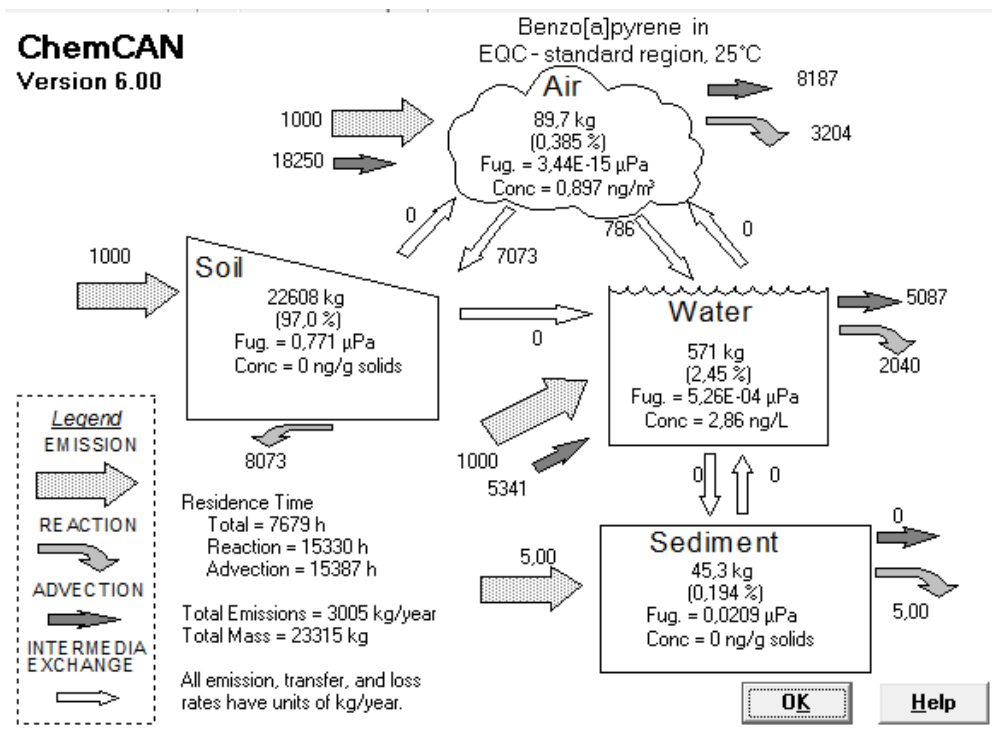


Figura 38. Diagrama de descargas Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

También nos ofrece los cálculos realizados para llegar a este diagrama simplificado (Figura 37) y los resultados concretos para cada una de las cualidades de la emisión como pueden ser la fugacidad del componente o el balance de masa (Figura 39).

ChemCAN Results

Benzo[a]pyrene

Other, EQC - standard region, 25°C

Mass Balance

Fugacity

Phase Properties

Advection

Reaction

Intermedia Transport

Individual Process D Values

Emission Rate	kg/year	kg/h	Inflow of Chemical		
Air	1000	0,114	Conc. in Air	2,00 ng/m³	2,00E-12 kg/m³
Water	1000	0,114	Conc. in Water	3,00 ng/L	3,00E-12 kg/m³
Soil	1000	0,114			
Sediment	5,00	5,71E-04	Inflow Rate in Air	18250 kg/year	
			Inflow Rate in Water	5341 kg/year	
Total Chemical Input 26596 kg/year			Loss Rate kg/year	Residence Time (h)	
Total Amount of Chemical in System 23315 kg			Advection	13274	15387
			Reaction	13323	15330
			Overall	26596	7679

Units  
☒ kg  
☐ mol

Units for Res Times  
☒ hours  
☐ days

OK

Help

Figura 39. Resultados obtenidos con Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

Mackay Level III es una herramienta que nos proporciona información detallada sobre el comportamiento de las emisiones de la industria, de manera que podemos adelantarnos a los acontecimientos y resolver este tipo de problemas antes de poner en marcha un proceso industrial (tratamiento de emisiones en planta) o para gestionar emisiones reales de la manera más eficiente.

### 5.5.3. Análisis DAFO

Tabla 11. Tabla análisis DAFO software Mackay Level III.

	<b>PUNTOS FUERTES</b>	<b>PUNTOS DÉBILES</b>
<b>DE ORIGEN INTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Estudio de situaciones bien acotadas.</li> <li>• Considera las condiciones del medio de manera concreta.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Librería de compuestos escasa.</li> </ul>
<b>DE ORIGEN EXTERNO</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Genera información detallada sobre emisiones.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• No se pueden estudiar mezclas.</li> </ul>

## 5.6.- PROGRAMA IRIS.

### 5.6.1. Información básica

<b>Nombre del programa:</b>	IRIS
<b>Desarrollador:</b>	EPA's IRIS Programs
<b>Fuente:</b>	U.S. Environmental Protection Agency
<b>Año:</b>	1985

#### **Descripción y características del programa:**

IRIS es una herramienta desarrollada por la Agencia de protección medioambiental estadounidense la cual es una de las bases de datos más potentes y de confianza que existen en el momento. Con esta base de datos podemos desarrollar informes robustos. Los informes desarrollados por el programa IRIS son la información de uso preferido para la EPA y otros grandes organismos internacionales.

Es una herramienta viva que se alimenta de informes realizados por el mismo grupo desarrollador o por otros y que está siempre abierta a peticiones de los usuarios (US EPA, ORD, NCEA, IRISD).

**Se puede acceder a esta herramienta en la siguiente dirección electrónica:**



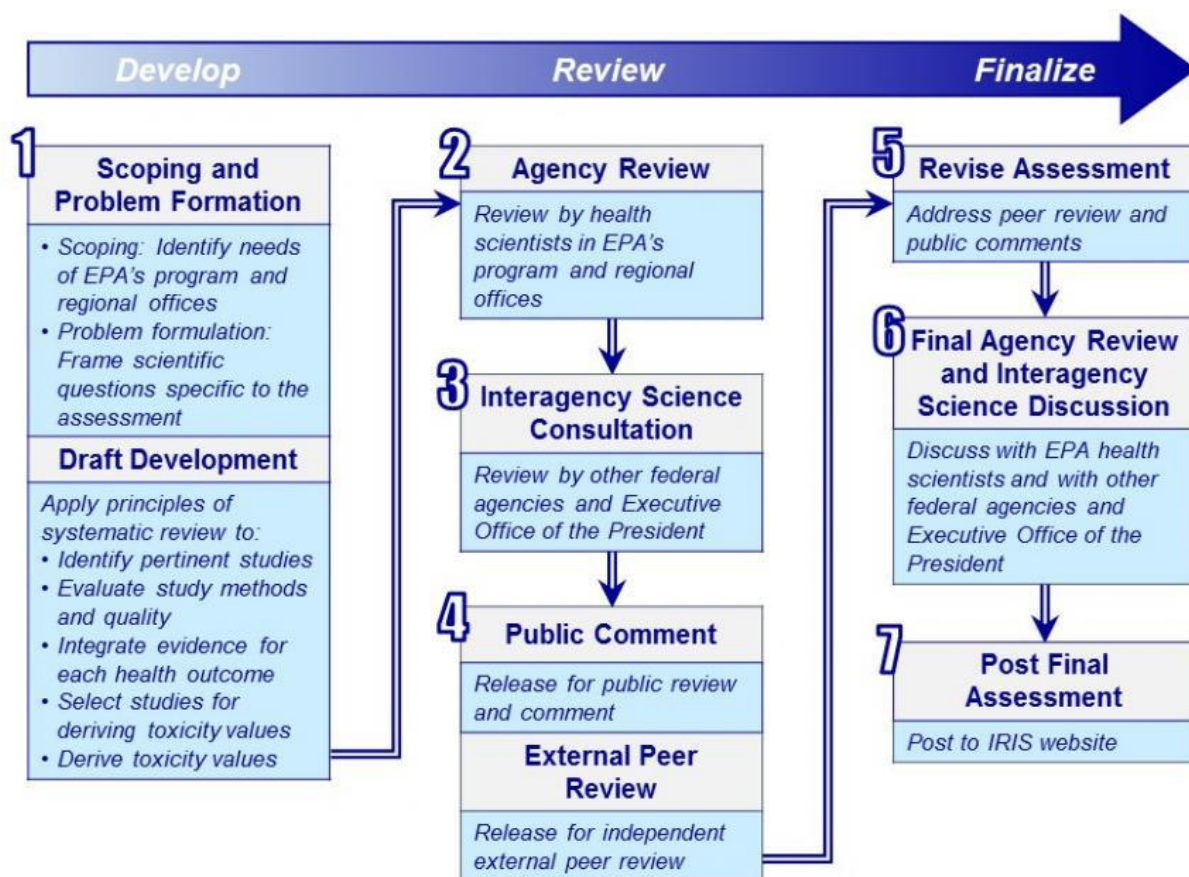
Tabla 12. Tabla resumen dato básicos IRIS.

Nombre	Fuente	Año	Versiones	Objetivo del programa	Variables de entrada	Variables de salida
IRIS	U.S. Environmental Protection Agency	1985	Solo existe una versión de esta base de datos, ya que, se va desarrollando y actualizando o continuamente con nueva información.	Base de datos sobre compuestos, mezclas o grupos de sustancias tóxicos de la EPA	Compuesto/os químicos que puedan resultar dañinos al medioambiente o a la salud humana.	Concentración de referencia (RfC)
						Dosis de referencia (RfD)
						Descriptor de cáncer
						Factor de ingestión
						Unidad de riesgo por inhalación

IRIS es una herramienta viva por lo que entendemos que su contenido está constantemente en cambio, actualizándose, ampliándose refinándose... Para que esto sea posible todos los informes realizados por el programa siguen una estructura de resolución estrictamente acotada (Figura 40).

Este proceso consiste en 7 pasos:

1. **Desarrollo de un borrador.**
2. **Revisión por la agencia (EPA).**
3. **Revisión por otras agencias del estado.**
4. **Revisión y comentarios públicos.**
5. **Revisión del informe por IRIS.**
6. **Revisión final por la EPA.**
7. **Redacción del informe final.**



## IRIS ASSESSMENT DEVELOPMENT PROCESS

The 7-step process has not changed. This figure refines earlier versions and includes the 2013 IRIS enhancements and the incorporation of systematic review approaches.

Figura 40. Diagrama de flujo generación de informes toxicológicos por IRIS (US EPA, ORD,NCEA,IRISD).

El informe proporcionado por IRIS nos proporciona cinco valores clave a la hora de hablar de información toxicológica sobre cualquier sustancia y esos son:

- Concentración de referencia (RfC): Es utilizada para evaluar el riesgo por inhalación y expresada normalmente en  $\text{mg}/\text{m}^3$  de aire (Ize Lema et al. 2010).
- Dosis de referencia (RfD): Es el nivel de exposición diaria que no produce un riesgo apreciable de daño en poblaciones humanas, incluyendo las subpoblaciones sensibles («2.5.2.1.1 Dosis de Referencia (DdR) | Superfund»).
- Descriptores de cáncer: Valores indicativos que muestran evidencias de que la exposición prolongada a cierta sustancia provoca la aparición de cáncer.
- Factor de ingestión: Cantidad mínima ingerida necesaria para ocasionar graves daños en el sistema digestivo u otros órganos del individuo incluso causar la muerte.
- Unidad de riesgo por inhalación: Coeficiente que indica el riesgo al que está sometido el individuo en relación a la cantidad de sustancia a la que está expuesto.



### 5.6.2. Interfaz y uso

Al ser una base de datos IRIS funciona de manera completamente diferentes a otras herramientas descritas hasta el momento. IRIS es una colección de informes en los cuales se realizan exámenes de toxicidad sobre una serie de compuestos, mezclas o familias de sustancias.

Una vez entramos en el apartado indicado para IRIS en la web de la EPA podemos seleccionar diversas opciones, en esta página web también podemos encontrar información relevante respecto a la historia de la EPA y del programa IRIS, datos de contacto... Pero con relación a las evaluaciones de impacto medioambiental nos interesa el apartado de informes toxicológicos para eso clicaremos en el rotulo “*Assessments*” cualquiera de las diferentes opciones de búsqueda que nos ofrecen (Figura 41).



Figura 41. Página principal del apartado IRIS en la web oficial de la EPA (US EPA, ORD,NCEA,IRISD).

Después de seleccionar el apartado de informes llegaremos a una página donde podremos consultar cualquier informe realizado con anterioridad por el programa IRIS. Los informes están ordenados por orden alfabético y también por órganos o sistemas los cuales se verían afectados por la exposición, inhalación o ingestión de la sustancia (Figura 42).

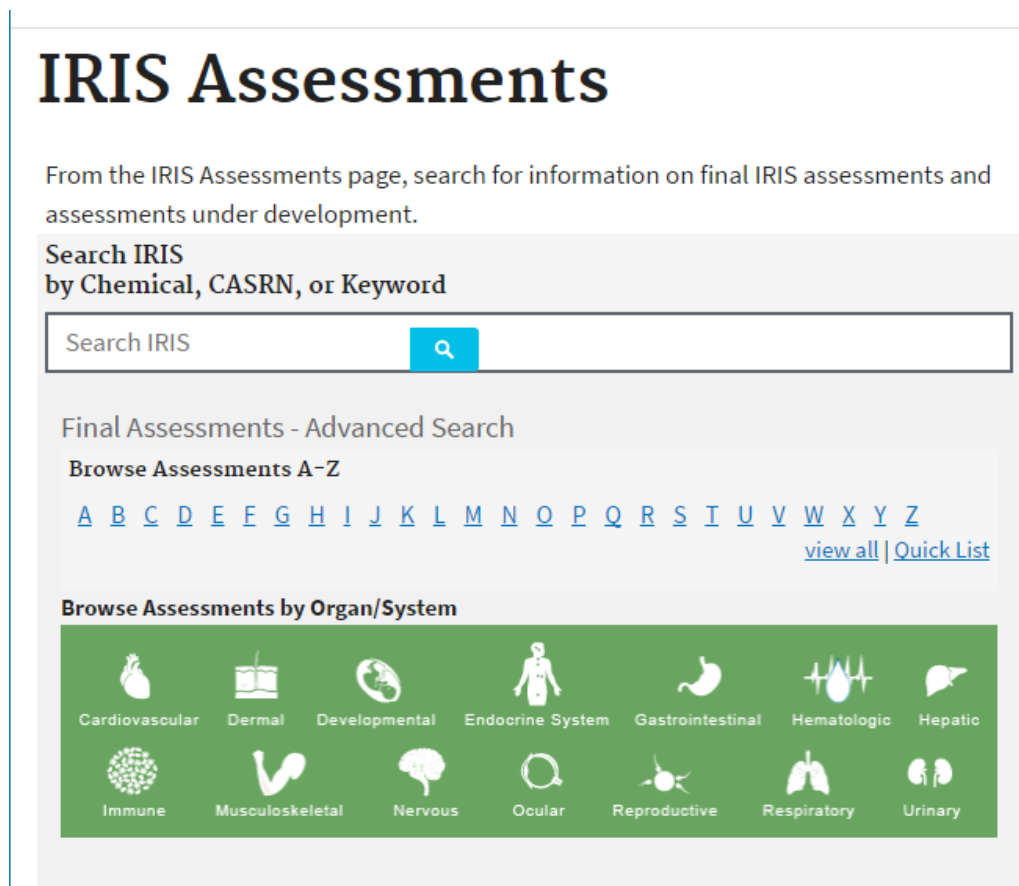


Figura 42. Menú principal del apartado IRIS en la web oficial de la EPA (US EPA, ORD,NCEA,IRISD).

Desde esta índice resulta fácil navegar entre los diversos informes y conseguir la información deseada, una vez lleguemos al informe de la sustancia buscada encontraremos información relevante como pueden ser índices de inhalación, ingestión... los sistemas y órganos humanos que se verían afectados por la exposición al tóxico, su estructura química y nombres con los cuales nos referimos a dicha sustancia (Figura 43).

# Carbaryl

CASRN 63-25-2

- [IRIS Summary \(PDF\)](#) (8 pp, 95 K)
- Status: Carbaryl is not being reassessed by IRIS at this time.
- [Reregistration Eligibility Decision \(RED\)](#) (PDF) (47 pp, 453 K)

## Key IRIS Values

## Health Hazard Assessments for Effects Other than Cancer

[Reference Dose for Oral Exposure \(RfD\) \(PDF\)](#) (8 pp, 95 K)

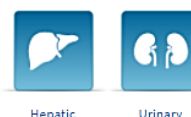
last updated: 01/31/1987

RfD (mg/kg-day)	System	Basis	PoD	Composite UF	Confidence
$1 \times 10^{-1}$	Hepatic, Urinary	Kidney and liver toxicity	NOAEL : 9.6 mg/kg-day	100	Medium

## Quick Links

- [Learn About IRIS](#)
- [IRIS Assessments](#)
- [IRIS Advanced Search](#)
- [IRIS Calendar](#)
- [IRIS Recent Additions](#)
- [Contact Us](#)

## Critical Effect Systems



## Chemical Structure for Carbaryl

Figura 43. Ejemplo Carbaryl informe simplificado en IRIS (US EPA, ORD,NCEA,IRISD).

Por lo tanto, IRIS resulta una herramienta muy útil a la hora de buscar información sobre componentes tóxicos, para terminar con el análisis de IRIS realizamos un análisis DAFO (Tabla 13).

### 5.6.3. Análisis DAFO

Tabla 13. Tabla análisis DAFO IRIS.

	PUNTOS FUERTES	PUNTOS DÉBILES
DE ORIGEN INTERNO	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Obtención de datos en formato manejable y comprensible.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dedicado a un propósito muy concreto.</li> </ul>
DE ORIGEN EXTERNO	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bases de datos sobre la cual se basan la mayoría de herramientas de soporte para EIA.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• No genera una evaluación de impacto ambiental completa ni parcial.</li> <li>• No resulta una herramienta crucial para el desarrollo de EIA.</li> </ul>

---

## 6. COMPARACIÓN DE LOS TIPOS DE SOFTWARE

---

Para realizar un análisis completo de todas herramientas por último las compararemos entre sí para ello utilizaremos la clasificación desarrollada en el cuarto apartado de este trabajo.

Empezaremos por las *Herramientas generación de Evaluación de impacto ambiental* estas herramientas son las que disponen de medios suficientes para realizar un informe de emisiones y nos ayudan, incluso decidiendo ellas mismas, cual es la mejor opción que repercutirá de forma más reducida en el medioambiente. Dentro de este grupo tenemos dos herramientas **Mackay Level III** y **EIA09**

Las dos herramientas que encontramos en este primer grupo presentan características completamente diferentes aunque estén destinada a resolver el mismo tipo de problemas, mientras Mackay Level III es una herramienta destinada exclusivamente a la realización de informes de emisiones de procesos de síntesis de compuestos químicos o de procesos exclusivamente de la misma industria EIA09 está enfocado a un abanico más amplio de proyectos donde podemos incluir tanto una EDAR como la construcción de una autopista. Por estas razones en este caso resulta conveniente decir que el software Mackay Level III es el más adecuado para la redacción de Evaluaciones de Impacto medioambiental de la Industria química, aunque cualquiera de las dos herramientas sería útil.

En segundo lugar, hablaremos de las *Herramientas de soporte par Evaluación de impacto ambiental* estas herramientas nos ayudan a resolver aspectos específicos de nuestro estudio como puede ser los materiales de construcción de nuestro edificio o los diferentes factores referentes a una substancia o compuesto concretos. Algunas de estas herramientas son **TANKS**, **BEES** y el software **EPISuite**.

En esta categoría encontramos infinidad de software que pueden añadir valor a nuestro informe por eso cabe decir que la comparación entre estas herramientas es imposible de realizar y conocer de la existencia de todas ellas es conveniente a la hora de realizar o llevar a cabo la EIA de cualquier proyecto.

Por último, tenemos las *Herramientas complementarias para Evaluación de impacto ambiental* estas herramientas no aportan de forma directa ningún valor a nuestro informe, pero lo complementan de maneras indirecta o nos ayudan a redactarlo de manera efectiva y coherente. Ejemplos de estas herramientas son la base de datos estadounidense **IRIS** o las normas o leyes como lo es la ISO14001.

En este caso todas estas herramientas complementarias son necesarias, ya que, no ayudarán a trazar los límites tanto legislativos como físicos y químicos de nuestro proyecto. Estas herramientas son la base sobre la cual construiremos un informe veraz y robusto es por eso por lo que debemos cerciorarnos de la fuente de estas herramientas.

Para el desarrollo de una Evaluación de Impacto Medioambiental en la industria química no todas estas herramientas nos serían útiles por eso es conveniente seleccionar la serie de programas que utilizaremos para llevar a cabo los casos de estudio. Como nos centraremos en la industria química y en su actividad normal (emisiones a la atmosfera, residuos producidos, vertidos al alcantarillado...) los programas EIA09 y BEES no nos resultarán útiles por diversas razones. En el caso de EIA09 nuestra fábrica problema ya existen y en funcionamiento por lo que no hace falta llevar a cabo un proyecto de construcción ni un estudio del impacto medioambiental que supondría la implantación de esta industria en un entorno específico, en el caso de BEES no realizaremos ni la construcción ni el mantenimiento de las instalaciones por lo que no necesitaremos información sobre la manera más respetuosa con el medioambiente de transportar o generar los bienes materiales necesarios para ello.

Por otro lado, en IRIS encontraremos información relevante respecto a productos toxicológicos y como estos afectarían a las inmisiones humanas; en EPISuite generaremos variables de dispersión, vida media... que nos resultarán útiles a la hora de considerar las emisiones pertinentes. Podremos estudiar los diferentes tanques y posibles pérdidas que puedan tener con TANKS y por último generar un informe completo de la situación global de la industria utilizando Mackay Level III.

En la siguiente Tabla (Tabla 14) encontraremos un resumen de esta comparación.

Tabla 14. Tabla comparación software.

Grupo	Programa	Utilidad en la Industria química	Sencillez instalación	Sencillez utilización	Análisis de situación
<b>Herramientas generación informes EIA</b>	Mackay Level III	1	6	6	6
	EIA09	5	4	4	4
<b>Herramientas de soporte EIA</b>	TANKS	2	5	5	5
	BEES	6	1	2	1
	EPISuite	3	3	3	3
<b>Herramientas complementarias EIA</b>	IRIS	4	2	1	2

**Leyenda**

1 = puntuación máxima

6 = puntuación mínima

---

## 7. CASOS DE ESTUDIO

---

En este apartado combinaremos las diferentes herramientas y las utilizaremos en casos reales, aplicando todo lo aprendido durante el proceso de estudio de los diferentes software y herramientas.

Con esto se pretende dar una tercera dimensión de realismo y aplicación para completar el análisis.

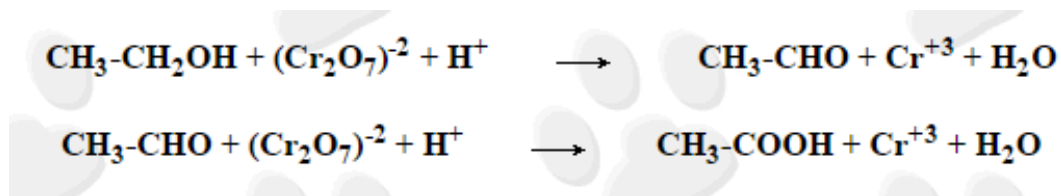
Estudiaremos casos muy diferentes, ya que, las herramientas desarrolladas en este trabajo son también de aplicación y propósitos diversos. Las diferentes experiencias están basadas en datos reales y por tanto los resultados que obtendremos resultarán tener una dimensión muy realista permitiéndonos observar el alcance y concreción de los informes desarrollados con o a partir de estas herramientas análisis y cálculo.

## 7.1. CASO DE ESTUDIO 1: Síntesis del Acetaldehído.

El acetaldehído es un compuesto inorgánico que se clasifica como producto intermedio, lo que significa que se utiliza para obtener otros productos finalistas los cuales resultan en el uso de todos nosotros como por ejemplo el ácido acético o el acetato de etilo entre tantos otros. El acetaldehído es un líquido incoloro y volátil, tiene bajo punto de fusión, con un penetrante olor a frutas. Es miscible con agua y con la mayoría de los disolventes orgánicos comunes. Se oxida con facilidad a ácido acético y es muy importante en síntesis orgánica. El acetaldehído puede obtener de diversos productos:

1. Etanol de fermentación de carbohidratos
2. Acetileno
3. Etileno
4. Hidrocarburos ligeros
5. Monóxido de carbono e hidrógeno (gas de síntesis)
6. Metanol

Para simplificar nuestro caso de estudio estudiaremos su obtención por oxidación del *etileno* de manera que la reacción es la siguiente:



**Figura 44. Reacción de oxidación del etanol** ((«100cia Química - Experiencias de laboratorio - Química de 2º de BAC»).

### 7.1.1. Objetivo

Queremos estudiar el impacto medioambiental que supone la obtención del acetaldehído a partir de etileno, desde el almacenamiento de la materia primera pasando por su síntesis hasta el almacenamiento del producto final.

### 7.1.2. Desarrollo

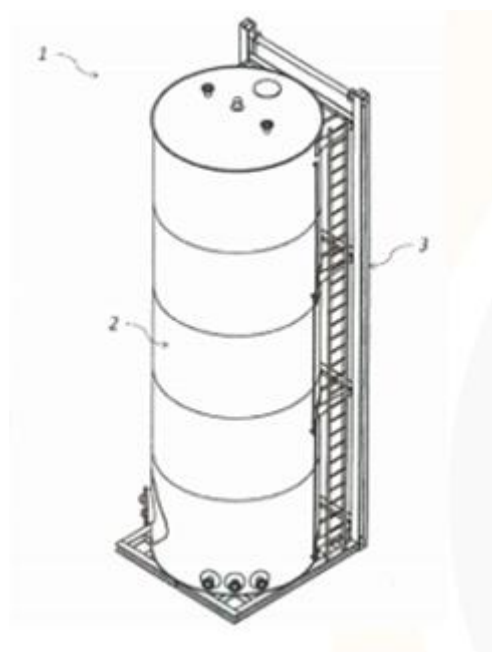
Analizaremos el proceso completo de síntesis del Acetaldehído o Etanal, sustancia orgánica de la cuál obtendremos información toxicológica de IRIS (Anexo 1) la herramienta oficial de la EPA para la búsqueda y uso de valores límites respecto a la salud humana, después estudiaremos esta sustancia gracias a los programas EPISuite nos proporcionará la estimación de valores clave como la constante de Henry o el log Kow, Mackay level III que nos proporcionará un esquema detallado de las descargas y sub-descargas del proceso de síntesis y TANKS mediante el cual calcularemos posibles fugas o emisiones del almacenaje de las diferentes sustancias envueltas en este proceso industrial.

Tomando como referencia un ejemplo de proyecto de final de carrera de la UAB en el que se calcula la producción de acetaldehído a partir de etileno obtendremos un marco definido en el que se desarrollará nuestro caso problema. Durante este análisis calcularemos las posibles fugas en los tanques de almacenaje de materias primas y productos finales, los datos básicos de las sustancias orgánicas involucradas en el proceso y por último todas las emisiones del proceso de síntesis de nuestro producto.

Primero definiremos los datos básicos del caso para calcular las fugas en los tanques de almacenamiento tanto de la materia prima como del producto final, primero calculamos todos los datos necesarios para cada producto usando EPISuite (Anexos 1 y 2) estos datos los iremos consultado y utilizando a lo largo de todo el caso.

En dicho trabajo, (Gonzalez et al. 2010), producir un total de 60000 Tn/año de manera que diariamente produciremos 164.383,56 Kg de acetaldehído y por lo tanto consumiremos unos 5751 kg/h de etileno, teniendo en cuenta que solo el 65% de este acabará transformándose en acetaldehído. Por lo tanto, almacenaremos un volumen de 276,45 m<sup>3</sup>/día, la densidad del etileno es igual a kg/m<sup>3</sup>, si consideramos un stock de seguridad de 4 días eso hará un total de 1105,8 m<sup>3</sup> de etileno almacenado. En este problema concreto el modelo escogido (Figura 45) es un tanque cilíndrico el cual tiene una capacidad de líquido de 297 m<sup>3</sup>, una longitud de 38 m y una anchura de 3,658m.





- 1: altura = 38 m**
- 2: diámetro = 3,658 m**
- 3: volumen = 297 m<sup>3</sup>**

Figura 45. Tanque teórico contenedor de Etileno («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos | Superintendencia de Industria y Comercio»).

Teniendo estos datos básicos podremos calcular las posibles emisiones por almacenaje de estos tanques, aunque necesitaríamos 4 tanques para poder gestionar toda la cantidad de etileno necesaria para la producción el cálculo realizaremos para uno y después extrapolaremos los resultados. Todos estos datos básicos están recogidos en una Tabla resumen (Tabla 15).

Tabla 15. Tabla resumen datos del problema.

DATOS BÁSICOS DEL PROBLEMA	
<b>Producción anual Acetaldehído</b>	164383,56 kg
<b>Consumo por hora de Etileno</b>	5751 kg
<b><math>\eta</math> de la reacción</b>	65%
<b>Forma del tanque contenedor</b>	Cilíndrico
<b>Volumen teórico tanque contenedor etileno</b>	297 m <sup>3</sup>
<b>Longitud teórica tanque</b>	38 m
<b>Diámetro del tanque</b>	3,658 m
<b>Tiempo de residencia del etileno en el tanque</b>	4 días
<b>Número teórico de tanque necesarios</b>	4 tanques

Como hemos visto en el análisis del programa TANKS necesitamos los datos del compuesto que almacenamos en el tanque, las medidas del mismo y el tiempo que este contiene el compuesto o en el caso de que hubiera rotaciones de sustancias cuantas son y cuánto tiempo permanecen en nuestro tanque.

Primero introducimos los datos mencionados anteriormente, observamos que cuando introducimos la altura necesaria de nuestro tanque el programa nos da error (Figura 46), ya que, la altura máxima permitida por el software son unos 75 pies (22,86 metros).

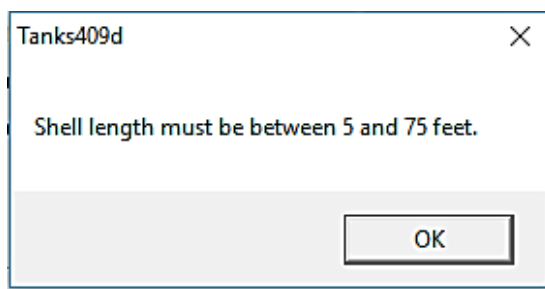


Figura 46. Pantalla de error TANKS.

Reajustaremos los parámetros de nuestro tanque para poder realizar los cálculos con el software TANKS, por lo tanto, la altura será 75 pies (22,86 metros) como estos tanques solo se pueden llenar hasta un 65% de su capacidad máxima necesitaremos en total 7 tanques con un volumen de  $240 \text{ m}^3$  cada uno. En la Tabla 16 encontraremos lo datos actualizados de nuestro problema:

Tabla 16. Tabla actualizada de datos del problema.

DATOS BÁSICOS DEL PROBLEMA	
<b>Producción anual Acetaldehído</b>	164383,56 kg
<b>Consumo por hora de Etileno</b>	5751 kg
<b><math>\eta</math> de la reacción</b>	65%
<b>Forma del tanque contenedor</b>	Cilíndrico
<b>Volumen teórico tanque contenedor etileno</b>	<b><math>240 \text{ m}^3</math></b>
<b>Longitud teórica tanque</b>	<b>22,86 m</b>
<b>Diámetro del tanque</b>	3,658 m
<b>Tiempo de residencia del etileno en el tanque</b>	4 días
<b>Número teórico de tanque necesarios</b>	<b>7 tanques</b>

Por lo tanto, nuestros tanques tendrán finalmente estas dimensiones (Figura 47):

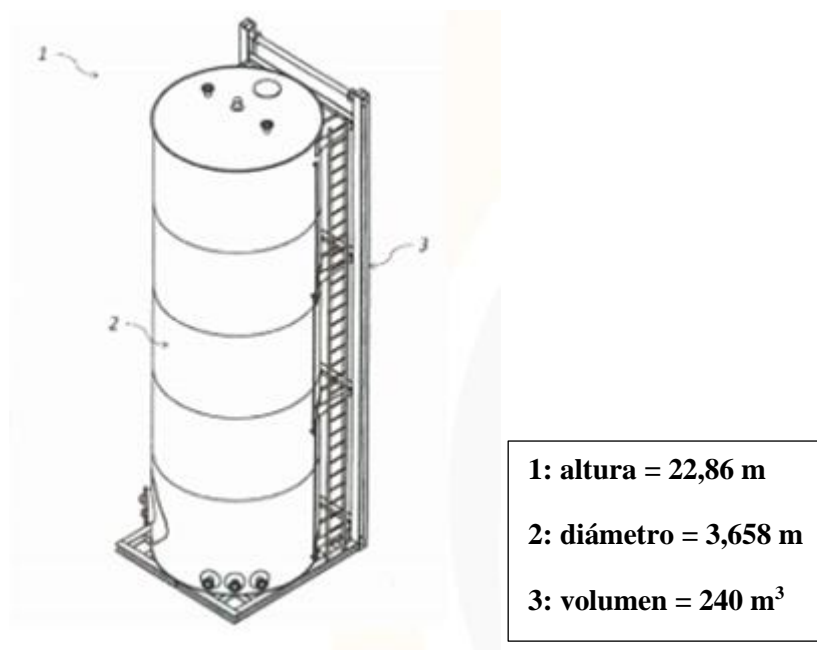


Figura 47. Tanque real contenedor de Etileno («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos | Superintendencia de Industria y Comercio»).

Volvemos a introducir los datos de nuevo en el programa, esta vez con una altura de 22,86 metros. Para calcular con la mayor concreción posible las emisiones y pérdidas de peso que sufrirá el tanque debemos elegir el lugar concreto donde estará localizado, en este caso el software tiene una base de datos altamente detallada sobre las temperaturas medias altas y bajas, humedad, ... aunque solo considera el espacio de los Estados Unidos por lo que elegimos por ejemplo Albania en el estado de Nueva York para situar nuestro tanque.

#### 7.1.3. Resultados

Cuando generamos nuestro informe (Anexo 2) nos aparecen los volúmenes para cada mes que ha contenido el tanque, el cómputo anual y, por último, nos aparecen las pérdidas de peso por trabajo y por respiración del material (Tabla 17).

Tabla 17. Tabla resumen resultados TANKS para el etileno.

<b>RESULTADOS EMISIONES ETILENO</b>	
<b>Número teórico de tanque necesarios</b>	7 tanques
<b>Pérdidas por trabajo</b>	44 Tn
<b>Pérdidas por respiración</b>	19 Tn
<b>Pérdidas anuales por tanque</b>	63 Tn
<b>Pérdidas totales anuales</b>	198 Tn

En este caso para uno de nuestros tanques las pérdidas totales anuales serían de 29 toneladas de material, que si lo extrapolamos a los tanques necesarios para el buen funcionamiento de nuestra planta serían 200 toneladas emitidas al terreno y atmósfera en un año de trabajo.

Ahora para estudiar el caso del Acetaldehído del cual produciremos, como hemos comentado anteriormente y se constata en el trabajo en el cuál hemos basado este caso (Gonzalez et al. 2010), 164.383,56 kg diarios por lo tanto necesitaremos almacenar un volumen de 260,61 m<sup>3</sup> diarios por lo que si quisiéramos almacenarlos durante 4 días en nuestras instalaciones antes de distribuirlo necesitaríamos dos tanques con un volumen de 176 m<sup>3</sup>, un diámetro de 3,658 m y altura de 16,75 metros, teniendo en cuenta que solo llenaremos hasta un 65% de su capacidad (Tabla 18).

Tabla 18. Tabla actualizada de datos del problema.

<b>DATOS BÁSICOS DEL PROBLEMA</b>	
<b>Producción anual Acetaldehído</b>	164383,56 kg
<b>Producción diaria Acetaldehído</b>	260.61 m <sup>3</sup>
<b>η de la reacción</b>	65%
<b>Forma del tanque contenedor</b>	Cilíndrico
<b>Volumen teórico tanque contenedor etileno</b>	176 m <sup>3</sup>
<b>Longitud teórica tanque</b>	16,75 m
<b>Diámetro del tanque</b>	3,658 m
<b>Tiempo de residencia del etileno en el tanque</b>	4 días
<b>Número teórico de tanque necesarios</b>	2 tanques

Con estos datos podemos dibujar el diagrama de nuestro tanque cilíndrico (Figura 48):

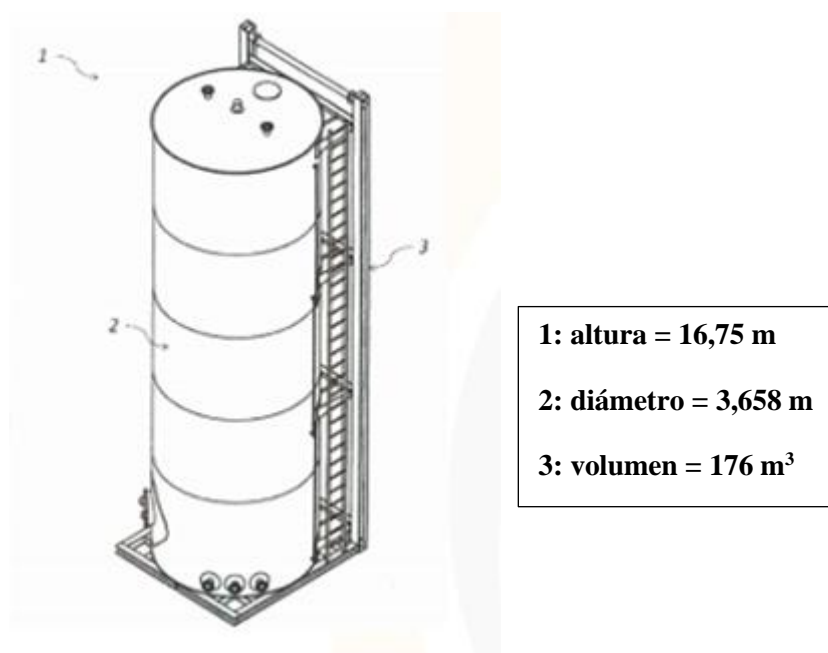


Figura 48. Tanque contenedor de Acetaldehído («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos | Superintendencia de Industria y Comercio»).

Completamos los datos necesarios de nuevo en nuestra herramienta TANKS para calcular las posibles fugas y emisiones de los tanques contenedores (Anexo 3). En la Tabla 19 encontramos un resumen de los resultados del software.

Tabla 19. Tabla resumen resultados TANKS para el acetaldehído.

RESULTADOS EMISIONES ETILENO	
Número real de tanques necesarios	2 tanques
Pérdidas por trabajo	47 Tn
Pérdidas por respiración	30 Tn
Pérdidas anuales por tanque	76 Tn
Pérdidas totales anuales	152 Tn

En este informe las emisiones resultan menores, ya que, el volumen de los tanques es inferior también, estamos emitiendo unas 76 Tn de material entre emisiones por trabajo y transpiración que multiplicado por dos son unas 152 Tn de acetaldehído.

De manera que estaremos emitiendo 152 toneladas de Acetaldehído y 198 toneladas de óxido de etileno, para valorar hasta qué punto estas posibles emisiones incontroladas pueden afectar a la salud humana y el medio ambiente buscaremos los informes toxicológicos respectivos para cada sustancia en la base de datos IRIS.

Estos informes constan de varias partes (Anexos 5 y 6), para empezar, tenemos tres categorías diferentes que son la ingesta de la sustancia, la inhalación de la misma y por último el informe de carcinogenicidad.

Para el Acetaldehído no tenemos informe de ingesta, pero sí de inhalación y carcinogenicidad. En Albania, Nueva York, viven cerca de 98.566 habitantes (últimos datos censo 2014) lugar donde hemos situado el caso.

Por lo tanto, si quisiéramos realizar un cálculo aproximado de la cantidad de sustancia a la que estarían expuestos dividiríamos las emisiones anuales por el número total de habitantes y obtenemos que a lo largo de un año un ciudadano de esta región inhalaría unos, asumiendo que todas las emisiones o la mayoría son a la atmosfera, 710,18 gramos de Acetaldehído al año y aproximadamente unos 2 gramos al día.

En el caso del óxido de etileno realizamos el mismo cálculo de manera que deducimos que aproximadamente inhalarían unos 2 kilogramos anuales de óxido de etileno y eso serían de manera aproximada unos 6 gramos al día. Tabla resumen (Tabla 20).

Tabla 20. Inmisiones sustancias para la población de Albania.

Substancia	Población	Emisiones totales anuales	Inmisiones anuales	Inmisiones diarias	Límites seguros
Acetaldehído	98566	152 Tn	710.18 g	$2 \times 10^6 \mu\text{g}$	$380 \mu\text{g}/\text{m}^3$
Etanol	98566	198 Tn	2000 g	$6 \times 10^6 \mu\text{g}$	$1798 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Pasamos a estudiar las características de las emisiones directas e indirectas de los dos componentes, para ello utilizaremos el software Mackay Level III. Utilizaremos los datos básicos para cada componente obtenidos gracias a la herramienta EPISuite (Anexos 1 y 2).

En primer lugar, estudiaremos el Acetaldehído que es una sustancia de tipo 1, lo que significa que ..., de este componente estamos emitiendo directamente por fugas en nuestros tanques 70 Tn al año lo que supondrían 70000 Kg, suponemos como ya hicimos anteriormente que todas las emisiones son de tipo gaseoso y por lo tanto se liberan a la atmósfera.

Mackay Level III realiza los cálculos pertinentes (Anexo 5) y nos devuelve este diagrama (Figura 48) especificando las diferentes cargas y descargas, el tiempo de residencia, las emisiones totales, la concentración que hay en el aire del contaminante y la fugacidad de la sustancia. Todos estos datos han sido calculados para un ambiente estándar predefinido por el propio programa.

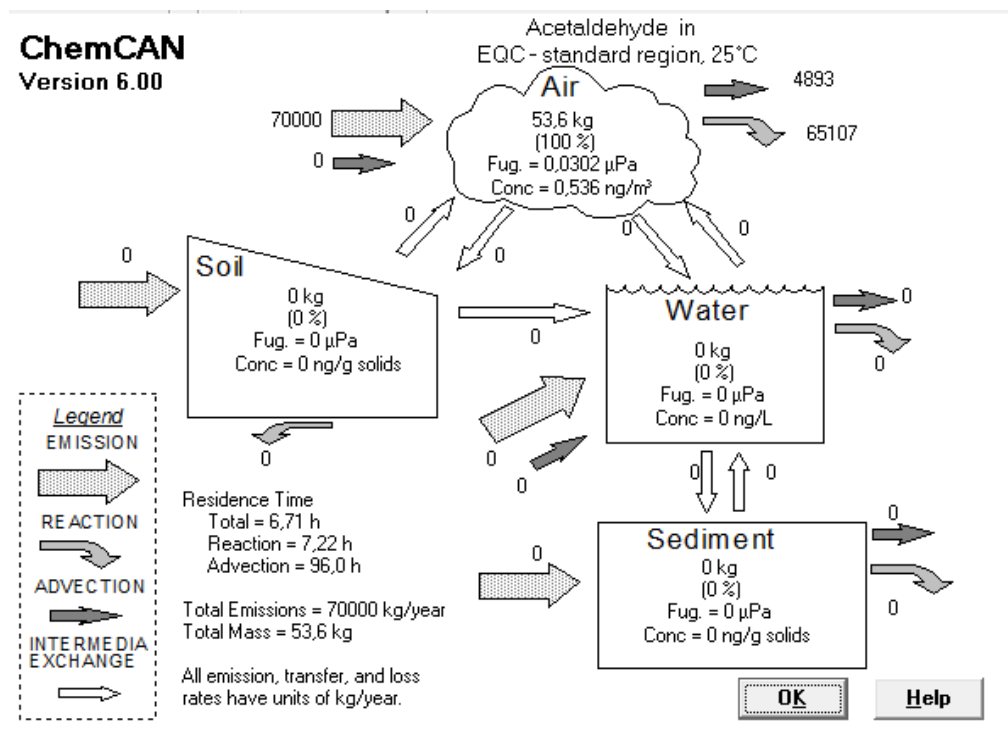


Figura 49. Diagrama de cargas y descargas generado por Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

El diagrama (Figura 49) nos da una idea de cómo se comportará la sustancia emitida una vez está en contacto con la atmósfera. El estudio de la emisión se completa con este apartado, ya que, la manera de gestionarlo antes de que liberemos el compuesto a la atmosfera puede mejorar el tiempo en el que este desaparezca de la misma o las condiciones en las que afecte al entorno en la Tabla 21 tenemos un resumen de los resultados.

Tabla 21. Inmisiones sustancias para la población de Albania para el acetaldehído.

<b>Tiempo de residencia total</b>	6.71 h
<b>Tiempo de residencia de reacción</b>	7.22 h
<b>Tiempo de residencia de advección</b>	56 h
<b>Medio de emisión</b>	Aire
<b>Fugacidad</b>	0.0302µPa
<b>Concentración</b>	0.536 ng/m³

Haremos lo mismo para el etileno obteniendo el diagrama pertinente y sus cálculos respectivos (Anexo 6) el diagrama (Figura 50) se presenta a continuación.

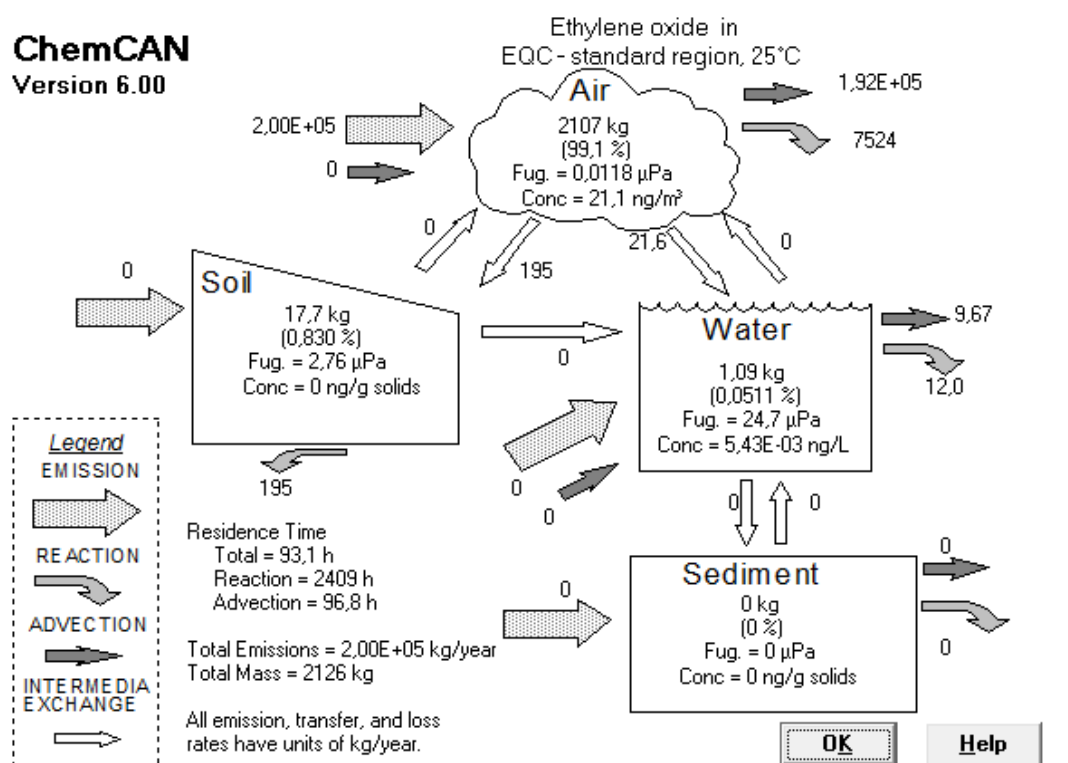


Figura 50. Diagrama de cargas y descargas generado por Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

Como podemos ver las emisiones de este compuesto se propagan por varios medios y en una cantidad mucho más alta al anterior compuesto, también el tiempo de residencia es mayor. En la Tabla 22 encontramos un resumen de los datos numéricos más importantes del diagrama.

Tabla 22. Tabla resultados Mackay Level III para el etileno.

<b>Tiempo de residencia total</b>	93.1 h
<b>Tiempo de residencia de reacción</b>	2409 h
<b>Tiempo de residencia de advección</b>	96.8 h
<b>Medio de emisión</b>	Aire, suelo y agua
<b>Fugacidad</b>	0.0302µPa
<b>Concentración</b>	0.536 ng/m³



#### 7.1.4. Conclusiones

- Como podemos ver en las Tablas 20,21 y 22 podemos observar que aunque el valor de inmisión total calculado que respirarían los habitantes de la zona sería un valor alto cuando comparamos las concentraciones en las descargas obtenidas por Mackay Level III con los valores de umbral de exposición estos resultan estar muy por debajo de los legislados, por lo tanto, podemos concluir que los límites están por debajo de las inmisiones seguras para la salud humana y por lo tanto no supone un riesgo real para la población. Aunque estas emisiones suponen un gran impacto medioambiental por lo que debemos asegurar que no se acaben produciendo para evitar efectos negativos irreversibles en el entorno.
- En este caso concreto para el Acetaldehído el tiempo de residencia es de tan solo 6,71 horas lo que quiere decir que la concentración de sustancia en la atmosfera no aumenta según pasan los días porque el contaminante es asimilado por la atmósfera relativamente rápido.
- El etileno persiste en la atmósfera durante más de 24 horas por lo que la concentración de la sustancia aumenta de manera exponencial según vamos trabajando y emitiendo más cantidad de este compuesto.
- Debemos ser mucho más cautos a la hora de manejar y prever el vertido en cualquier forma de este compuesto, ya que, es más fácil de controlar que luego intentar eliminarlo de la atmósfera.

## 7.2. CASO DE ESTUDIO 2: Proyecto instalación EDAR.

### 7.2.1. Objetivos

Para este segundo caso de estudio nos centraremos en un proyecto de instalación de un EDAR (Estación de aguas residuales) o depuradora de agua y el impacto ambiental que el proyecto implicará.

Una EDAR (Figura 51) es una estación de tratamiento de aguas residuales, a esta llegan todas las aguas negras domesticas donde se someten a una serie de tratamientos para poder ser devueltas de nuevo a su ciclo natural.



Figura 51. Pantalla de error TANKS («Proyecto Biosfera»).

Las aguas residuales se tratan por fases con el fin de poder tratar los diferentes contaminantes que contienen, estas fases suelen ser:

- I. Pretratamiento: Consiste en una serie de tratamientos físicos que tienen por fin eliminar contaminantes en suspensión contenidos en las aguas. Con este paso realizamos la primera etapa de adecuación y además evitamos el deterioro de los siguientes equipos.
- II. Decantación primaria: En esta primera decantación eliminamos la mayoría de los sólidos sedimentables y otras materias en suspensión que no fueron eliminadas en el pretratamiento.
- III. Tratamiento biológico: La materia orgánica se degrada gracias a microorganismos varios en tanques biológicos.

- IV. Decantación secundaria: En esta segunda decantación eliminamos el fango biológico.
- V. Tratamiento terciario: Se realizan según el tipo de agua tratada y el siguiente uso que se le dé, normalmente se realizan este tipo de tratamientos para adecuar las aguas con un fin determinado (aguas de regado).

Utilizaremos el software EIA09, esta herramienta nos ayudará a decidir la alternativa más adecuada para este proyecto de acuerdo con nuestras necesidades y las del medio ambiente.

En el caso de este proyecto se plantean tres alternativas:

1. Situar la planta fuera del núcleo urbano.
2. Instalar la planta dentro del núcleo urbano.
3. No realizar la construcción de la planta.

### 7.2.2. Desarrollo

En la realización del informe le hemos dado a cada alternativa puntos a favor y encontrar los cuales valora de forma numérica para ayudarnos a seleccionar la mejor alternativa de las tres. Para cada alternativa estos han sido los puntos a tener en cuenta (Tabla 23).

Tabla 23. Tabla resumen factores ambientales y socioeconómicos relevantes.

<b>Factor</b>	<b>Descripción</b>	<b>Alternativa 1</b>	<b>Alternativa 2</b>	<b>Alternativa 3</b>
<b>Costes</b>	Con este punto queremos valorar el coste de construcción de conductos para el transporte de las aguas residuales fuera del núcleo urbano.	Coste alto, factor negativo.	Coste bajo, factor positivo.	Coste cero, factor positivo.
<b>Olores</b>	En este punto se consideran los olores generados por la actividad normal de la planta.	Imperceptibles, factor positivo.	Perceptibles, factor negativo.	No generamos olores, factor positivo.
<b>Ruidos</b>	Este punto valora los ruidos que provienen de la planta de tratamiento de aguas debido a su funcionamiento normal.	Imperceptibles, factor positivo.	Perceptibles, factor negativo.	No generamos ruido, factor positivo.

<b>Factor social</b>	Este se refiere al impacto negativo que tendría el no construir esta planta, ya que, resulta necesaria debido a la densidad de población.	Construcción de la planta, factor positivo.	Construcción de la planta, factor positivo.	No se construye la planta, factor negativo.
----------------------	---	---	---	---

### 7.2.3. Resultados

Una vez definidos estos factores y calculado su valor numérico procedemos a la generación del informe (Anexo 5). Este informe contiene los detalles de cada una de las alternativas además de las valoraciones numéricas, el peso de cada factor y una valoración sobre cuál de las tres es la más adecuada (Tabla 24).

Tabla 24. Resultados evaluación de alternativas.

	<b>Localización</b>	<b>Olores</b>	<b>Ruidos</b>	<b>Efectos ambientales</b>	<b>Puntuación</b>
<b>Alternativa 1</b>	-26.24	17.13	17.13	-	<b>8.02</b>
<b>Alternativa 2</b>	-	-11.25	-	-26.2	-37.45
<b>Alternativa 3</b>	-	-	-	-24.0	-24.0

### 7.2.4. Conclusiones

- Como podemos ver en la Tabla anterior (Tabla 24) en nuestro caso el informe revela que la mejor opción es la Alternativa 1 (Construir la planta fuera del núcleo urbano) debido a las implicaciones sociales. Muchos de los factores se clasifican como “null2 sin valor lo que significa que el factor no se presenta y por lo tanto no se puede valorar de manera cuantitativa.
- Este tipo de informe resulta altamente útil para cribar ideas en la fase previa del proyecto no sería adecuado dejarse guiar por este informe para la realización completa de un proyecto, ya que, los factores tanto como el peso de los mismos son definidos por el usuario.
- La subjetividad de esta herramienta hace que sea útil pero siempre justificada por otro tipo de estudios, informes, ejemplo de proyectos previos o similares, etc.

### 7.3. CASO DE ESTUDIO 3: Uso del clorobenceno en la industria textil.

#### 7.3.1. Objetivos

En este último caso estudiaremos el uso del clorobenceno (Figura 52) en la industria textil; la industria textil es una de las industrias con mayor impacto ambiental debido al uso de componentes químicos bioacumulables, la cantidad desmesurada de agua que se consume en sus procesos, también el consumo energético supone una repercusión en el medio ambiente y en la sociedad. Es por eso que desde la industrialización hasta hoy los procesos han ido actualizándose y adaptándose a los nuevos tiempos.

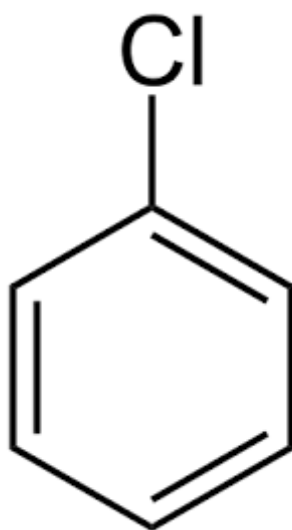


Figura 52. Estructura de un cloro benceno («Clorobenceno - Wikipedia, la enciclopedia libre»)

Los cloro-bencenos son sustancias químicas que se utilizan como disolventes en la fabricación de tintes para la industria textil y también como intermediarios químicos para catalizar reacciones o para llevar acabo reacciones intermediarias entre fases de un proceso industrial químico.

#### 7.3.2. Desarrollo

Para realizar el estudio de este caso utilizaremos Mackay Level III, con esta herramienta generaremos un diagrama de descargas con los datos que especifiquemos de manera que obtendremos una idea global del comportamiento de esta familia de sustancias en el entorno. Como no hemos conseguido datos reales para este caso utilizaremos los parámetros predeterminados por la misma herramienta sobre todo en el apartado de emisiones (Figura 53), ya que, los datos más concretos los encontraremos gracias a EPISuite (Anexo 8).

Emissions and Inflows	
<b>Emission Rate (kg/year)</b>	
Into Air	1000
Into Water	1000
Into Soil	1000
Into Sediment	5
<b>Advective Inflow Concentrations</b>	
Concentration in Air (ng/m³)	2
Concentration in Water (ng/L)	3
Default Values	OK
Cancel	Help

Figura 53. Valores para emisiones standard Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

### 7.3.3. Resultados

Una vez completados todos los campos obligatorios generamos una serie de resultados (Anexo 9) con nuestro software que nos proporciona también el siguiente diagrama (Figura 54).

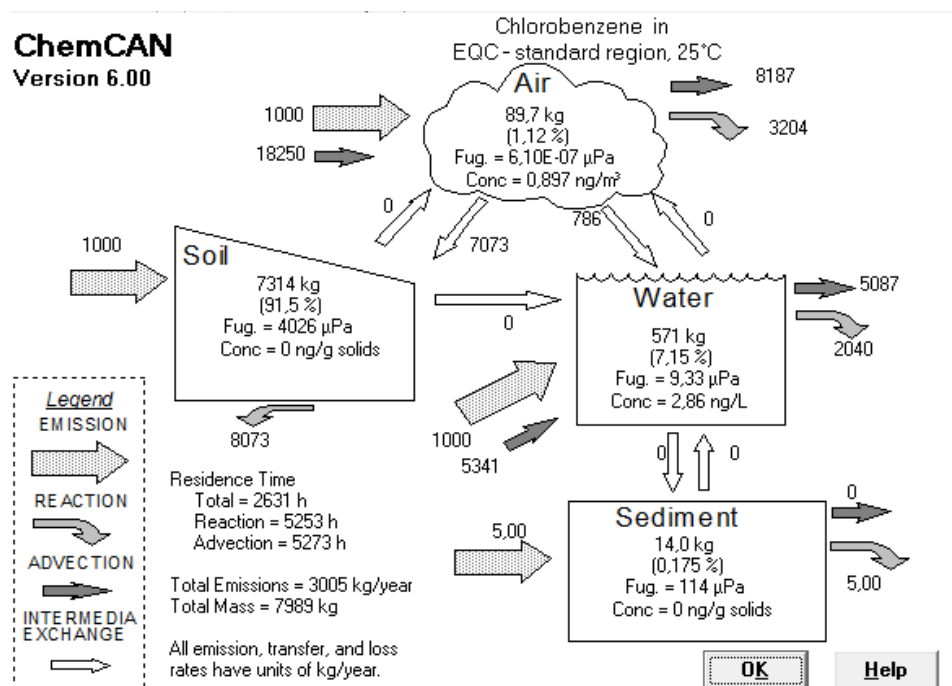


Figura 54. Diagrama descargas Cloro benceno Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

Como podemos observar en el diagrama anterior la sola emisión de 3005 kg de compuesto permanecerá en el entorno aproximadamente 106 días lo que supone casi medio año, este dato nos da una idea de porque son peligrosas las emisiones en continuo de los clorobencenos que al ser bioacumulables pueden llegar a suponer concentraciones altísimas tanto en la atmosfera, como en sedimentos y agua. En la Tabla 25 podemos encontrar el resumen de resultados.

Tabla 25. Tabla resultados Mackay Level III para la emisión de cloro benceno.

<b>Tiempo de residencia total</b>	2631 h
<b>Tiempo de residencia de reacción</b>	5253 h
<b>Tiempo de residencia de advección</b>	5273 h
<b>Medio de emisión</b>	Aire, suelo, agua y sedimentación
<b>Fugacidad Aire</b>	6.01E-07 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Aire</b>	0.897 $\text{ng/m}^3$
<b>Fugacidad Agua</b>	9.33 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Agua</b>	2.86 $\text{ng/l}$
<b>Fugacidad Suelo</b>	4026 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Suelo</b>	0 $\text{ng/g}$
<b>Fugacidad Sedimentación</b>	114 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Sedimentación</b>	0 $\text{ng/g}$

#### 7.3.4. Conclusiones

- Según la Tabla de resultados 25 el medio que se ve más perjudicado por la emisión de este contaminante sería el agua donde la concentración de contaminante sería alta, aunque la fugacidad nos mostraría que el elemento se comporta de manera similar a su comportamiento ideal, en cambio, para el suelo este comportamiento se aleja mucho de lo que podemos prever desde el comportamiento ideal de esta sustancia.
- Como hemos dicho anteriormente los clorobenceno son altamente peligrosos para nuestra salud, la exposición continua i persistente a este tipo de sustancias favorece las afecciones en el hígado, tiroides y sistema nervioso central, el hexaclorobenceno (HCB) es la sustancia más tóxica y persistente de la familia y actúa también como disruptor hormonal.
- Además los cloro-bencenos son componentes que están clasificados como *sustancias peligrosas prioritarias* por lo Unión Europea ((«Capítulo 1 industria textil» [sin fecha]) lo que significa que están incluidos en una serie de medidas drásticas para evitar la contaminación de las aguas superficiales en suelo Europeo.
- Estos componentes también están clasificados como *componentes orgánicos persistentes* por el convenio de Estocolmo (Centro nacional de referencia sobre contaminantes orgánicos persistentes [sin fecha]) y deben ser prohibidos o en proceso de eliminación de estos procesos industriales.

## 7.4. CASO DE ESTUDIO 4: Instalación electrolito con Arsénico.

### 7.4.1. Objetivos

Para este caso estudiaremos los posibles riesgos e implicaciones negativas de la implantación de un nuevo electrolito en la industria galvánica que tiene un alto contenido en arsénico.



Figura 55. Información sobre Arsénico.

En una empresa que se dedica a la galvanotecnia está probando nuevas aleaciones de metales preciosos para electroformar oro de 23,5 kt. Una de las opciones proporcionadas por el proveedor es un electrolito que contiene un alto contenido en arsénico pero que proporciona a la aleación el color y acabado deseados por el departamento de control de calidad.

### 7.4.2. Desarrollo

Para decidir si el uso de este electrolito es seguro consultaremos la ficha técnica del mismo como la información toxicológica para el arsénico que aparece en IRIS, las posibles emisiones del almacenamiento del producto utilizando TANKS y, por último, aunque nos gustaría poder estudiar las descargas directas e indirectas del trabajo con arsénico con la ayuda de Mackay Level III al tratarse de una sustancia inorgánica no podremos completar nuestro estudio con este apartado.

La ficha técnica del electrolito dice que contiene de manera aproximada 1 g/l de arsénico, este electrolito opera a 45°C y a un valor para el pH de 6, estos datos los utilizaremos para calcular las posibles fugas de nuestro tanque. Por otro lado, necesitamos un tanque que contenga 43 litros de producto por lo que la capacidad de nuestro tanque será un 25% mayor por seguridad lo que son 54 litros.

Según la OMS ((«OMS | Arsénico» 2017)) el arsénico es una sustancia muy tóxica y la exposición prolongada al arsénico en alimentos y agua contaminados puede provocar cáncer y lesiones cutáneas. El mayor peligro al que nos exponemos con este compuesto es cuando está presente en aguas de regado y por lo tanto llega a los alimentos y a veces incluso llegan al agua de consumo. Por esta razón las fases más críticas de la implantación



de este electrolito serán el uso diario y por lo tanto la exposición de los operadores; y el tratamiento del residuo una vez dejamos de utilizar el electrolito debido a su envejecimiento.

Debido a la peligrosidad de esta sustancia la OMS ha puesto a disposición de todo el mundo valores específicos para el arsénico según los cuales poder desarrollar normativas y regular este tipo de vertidos, este límite está en  $10 \mu\text{g/l}$  («OMS | Guías para la calidad del agua potable, tercera edición» 2013) un valor de referencia, ya que, la medida exacta de este compuesto depende de muchas variables que la hacen complicada.

#### 7.4.3. Resultados

Primero empezaremos por estimar los datos concretos para el arsénico con EPISuite (Anexo 7), como podemos ver al ser el Arsénico una sustancia inorgánica la herramienta nos advierte de que todas las estimaciones realizadas no son válidas.

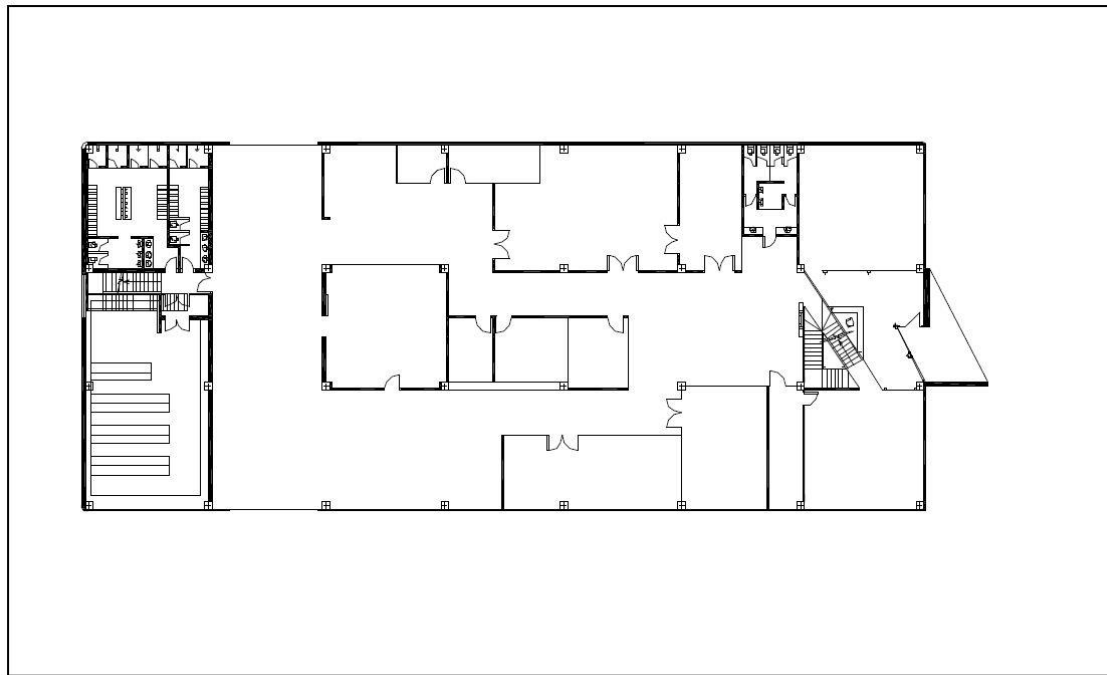
#### 7.4.4. Conclusiones

- Al no poder estimar los datos necesarios para introducir en el programa Mackay Level III nos resultará imposible obtener resultados sobre este caso.
- En el caso de TANKS herramienta que solo es capaz de estimar fugas para derivados del petróleo y sustancias orgánicas, por lo que, obtener resultados en nuestro caso resulta imposible.
- IRIS, esta herramienta proporciona información toxicológica sobre gran parte de las sustancias químicas más utilizadas y conocidas en el caso del Arsénico, ya que, es una sustancia tóxica de gran importancia encontramos un informe completo sobre límites de inmisión y enfermedades asociadas a la exposición.

## 7.5. CASO DE ESTUDIO 5: Construcción de una nave industrial.

### 7.5.1. Objetivos

Queremos estudiar el impacto ambiental de los elementos que intervienen en la construcción de una nave industrial (Figura 56).



Planta Baja

Figura 56. Menú selección opciones(«VENTA EDIFICIO CORPORATIVO PARQUE TECNOLÓGICO | Venta | Parque Tecnológico Paterna»).

En la figura 56 podemos ver un esquema sencillo de la planta de una nave industrial estándar.

### 7.5.2. Desarrollo

La herramienta BEES nos permitirá comparar entre varios elementos para decidir cuál de ellos resulta más “verde”, es decir, evalúa que producto desde la obtención de su materia prima hasta el transporte al lugar de emplazamiento es el que menos emisiones de CO<sub>2</sub> genera. Utilizaremos esta herramienta para calcular aproximadamente el impacto total de los elementos de construcción de nuestra nave industrial.

Cada proyecto tiene una serie de factores los cuales ayudan a calcular el cómputo total de emisiones de CO<sub>2</sub> para cada caso. En nuestro caso de estudio elegiremos los pesos y factores seleccionados por la EPA, de esta manera nos basamos en valores de peso desarrollados a partir de normativas europeas e internacionales (Figura 57).

EPA Science Advisory Board-based ▼	
Impact	Weight
Global Warming	16
Acidification	5
Eutrophication	5
Fossil Fuel Depletion	5
Indoor Air Quality	11
Habitat Alteration	16
Water Intake	3
Criteria Air Pollutants	6
Smog	6
Ecotoxicity	11
Ozone Depletion	5
Human Health	11
Sum:	100

Figura 57. Tabla peso de los factores («BEES»).

Trataremos cada fase de la construcción de manera individual y al final sumaremos la cantidad total de emisiones de CO<sub>2</sub> a la atmósfera que supondrá la instalación de nuestra nave. Las diferentes fases de la construcción que estudiaremos son las siguientes.

**a. Subestructura:**

1. Cimientos: Base de la construcción que se encuentra bajo tierra y sobre la cuál recaerá todo el peso de la edificación («Que es ... Definiciones Conceptos y Significados - DiccionarioActual»).
2. Sótano: Planta del edificio que está localizada por debajo del nivel de la calle («Que es ... Definiciones Conceptos y Significados - DiccionarioActual»).

**b. Coraza:**

1. Techo: Parte interior y superior que cubre o cierra un edificio o habitación («Definición de Techo - Diccionario de Construcción y Arquitectura - Glosario»)
2. Cerramientos exteriores: son aquellos elementos cuya función principal consiste en proteger el interior del edificio de los agentes externos («Cerramientos Exteriores | Construpedia, enciclopedia construcción».
3. Superestructura: Parte superior del conjunto estructural, que se encuentra por encima del suelo («Definición de Superestructura » Concepto en Definición ABC»).

**c. Interiores:**

1. Construcción de interiores: Consiste en el proyecto ornamental, mobiliario y otros acabados («Definición de decoración interior | Diccionario de arquitectura y construcción»).

2. Acabados: Todos aquellos materiales que se colocan sobre una superficie de obra negra para darle terminación, quedando esta con un aspecto habitable («Definición de acabados | Diccionario de arquitectura y construcción»).

**d. Acondicionamiento:**

1. Acondicionamiento: Preparación de las instalaciones para ser habitadas, por ejemplo, instalación de un sistema de climatización.

### 7.5.3. Resultados

Para mostrar de una manera más visual los resultados utilizaremos una Tabla (Tabla 26) donde aparecerán las diferentes opciones para cada fase de la construcción, como están valoradas y cuál es la que se selecciona.

Tabla 26. Tabla resultados BEES para la construcción de la nave industrial.

Fase construcción	Sub-fase construcción	Sub-sub-fase de construcción	Elemento	Distancia (millas)	Valoración	Selección
Subestructura	Cimientos	Losas	Producto Anónimo IP Cemento	50	33.8096	
			Lafarge Portland Tipo I Cemento	50	33.6751	
			Cemento de ceniza generico 35%	50	32.5153	X
	Sótano	Paredes	Producto Anónimo IP Cemento	50	31.9386	
			Lafarge Silice fume Cemento	50	41.4445	
			Lafarge conjunto de bloques	50	26.6168	X
Coraza	Techo	Aislamiento	Producto Anónimo R-38	500	50.8488	
			Celulosa soplada genérica	200	19.2598	X

			R38			
			Lana Mineral Soplada Genérica R-38	200	29.8917	
		Revestimiento	Primer recubrimiento Utilithane	800	100	X
		Cubiertas	Hormigón asfáltico genérico / 1 capa de fieltro	500	27.0406	X
			Hormigón asfáltico genérico / 2 capas Fielto	500	29.2287	
			Teja de arcilla genérica / 1 capa de fieltro	500	43.7307	
	Cerramientos exteriores	Aislamiento de paredes	Producto anónimo R-13	500	49.7369	
			Celulosa soplada genérica R-13	200	20.7479	X
			Fibra de vidrio soplada R-13	200	29.5152	
		Exterior paredes	Riel cerrado Kingston (vinilo)	717	38.8601	X
			Riel cerrado Panorama (composite)	717	63.1399	
	Superestructura	Vigas	Producto Anónimo 4KSI	50	31.5639	X
			Cemento genérico de piedra caliza al 20%	50	35.0445	
			Cemento de ceniza genérico al 15% 4KSI	50	33.3915	
		Columnas	Cemento genérico de escoria al 50% 5KSI	50	30.3347	X
			Cemento de humo de sílice 4KSI	50	38.0515	
			Producto anónimo 5KSI	50	31.6139	

		Revestimiento del techo	Genérico de placa de filamento orientado	500	65.3318	
			Revestimiento de Contrachapado Genérico	500	34.6682	X
Interiores	Construcción de interiores	Separadores prefabricados	Paneles Trespa Athlon	500	45.6770	X
			Paneles Trespa Virtuon	500	54.3230	
		Taquillas	Paneles Trespa Athlon	500	45.6770	X
			Paneles Trespa Virtuon	500	54.3230	
	Acabados	Acabados de paredes	Genérico consolidado	10	49,9168	X
			Genérico para pintura latex reprocesada	500	50,0832 g	
Acondicionamiento	Acondicionamiento	Sillas	Silla genérica de oficina	500	1274.82	X
			Silla de oficina Herman Miller Aeron	500	1969.89	
			Silla de oficina Herman Miller Ambi	500	1274.82	
		Escritorios	Environ Biocompuestos BIOFIBER de Trigo	1500	-9.8725	X
			Paneles Trespa Athlon	500	55.7316	
			Paneles Trespa Toplab Plus	500	54.1409	

Como podemos ver en la Tabla anterior cada material recorre una distancia diferente en millas hasta el lugar de construcción, también reciben una puntuación la cual se calcula a partir de la Tabla de pesos definida por la EPA. El valor menor de puntuación indica el producto que menos impacto ambiental provoca y por lo tanto el que respeta más el medio ambiente.

Una vez seleccionados los artículos y materiales que suponen un impacto medioambiental menor de todos los comparados, buscaremos la equivalencia en emisiones de CO<sub>2</sub> para cada uno de ellos (Tabla 27).

Tabla 27. Tabla resumen emisiones totales de CO<sub>2</sub>.

<b>Fase construcción</b>	<b>Sub-fase construcción</b>	<b>Sub-sub-fase de construcción</b>	<b>Elemento</b>	<b>Porcentaje aportación</b>	<b>Equivalencia CO<sub>2</sub></b>
<b>Subestructura</b>	Cimientos	Losas	Cemento de ceniza generica 35%	0,0039%	3050 g
	Sótano	Paredes	Lafarage conjunto de bloques	0,0069%	6163.3333 g
<b>Coraza</b>	Techo	Aislamiento	Celulosa soplada genérica R38	0,0003%	169,0403 g
		Revestimiento	Primer recubrimiento Utilithane	0,002%	304 g
		Cubierta	Hormigón asfáltico genérico / 1 capa de fieltro	0,307%	145013,36 g
	Cerramientos exteriores	Aislamiento de paredes	Celulosa soplada genérica R-13	0%	75,0965 g
	Superestructura	Vigas	Producto Anónimo 4KSI	0,012%	9600 g
		Columnas	Cemento genérico de escoria al 50% 5KSI	0,0151%	12800 g
		Revestimiento del techo	Revestimiento de Contrachapado Genérico	0,0005%	197,4147 g
<b>Interiores</b>	Construcción de interiores	Separadores prefabricados	Paneles Trespa Athlon	0,0061%	4050 g
		Taquillas	Paneles Trespa Athlon	0,0061%	4050 g

	Acabados	Separadores de baños prefabricados	Genérico consolidado	0,0072%	68,3340 g
Acondicionamiento	Acondicionamiento	Sillas	Silla genérica de oficina	0,5334%	395000 g
		Escritorios	Environ Biocompuestos BIOFIBER de Trigo	-0,0018%	

#### 7.5.4. Conclusiones

- En la Tabla 27 hemos añadido dos columnas la aportación media en porcentaje de la cantidad de CO<sub>2</sub> anual per cápita en los Estados Unidos, como hemos comentado con anterioridad la mayoría de estos software y herramientas han sido desarrolladas por el gobierno de los Estados Unidos y por eso se basan en datos recogidos por ellos mismos.
- La aportación total anual de CO<sub>2</sub> de la instalación sería de  $62,2 \times 10^3$  Tn.
- Todos los productos utilizados suponen menos de un 1% de la cantidad total de CO<sub>2</sub> per cápita que se libera en los Estados Unidos en un año lo que supone una aportación ínfima en emisiones de gases invernadero a la atmosfera.
- BEES es una herramienta muy útil que puede ser utilizada en proyectos diversos y por lo tanto demuestra ser una herramienta completa.



## 7.6. CASO DE ESTUDIO 6: Planta refinadora de petróleo.

### 7.6.1. Objetivos

En este caso de estudio estudiaremos la obtención de ceras de parafina y como su obtención y almacenaje pueden llegar a impactar en el medio, estas sustancias son un producto de la destilación del petróleo (Figura 58).

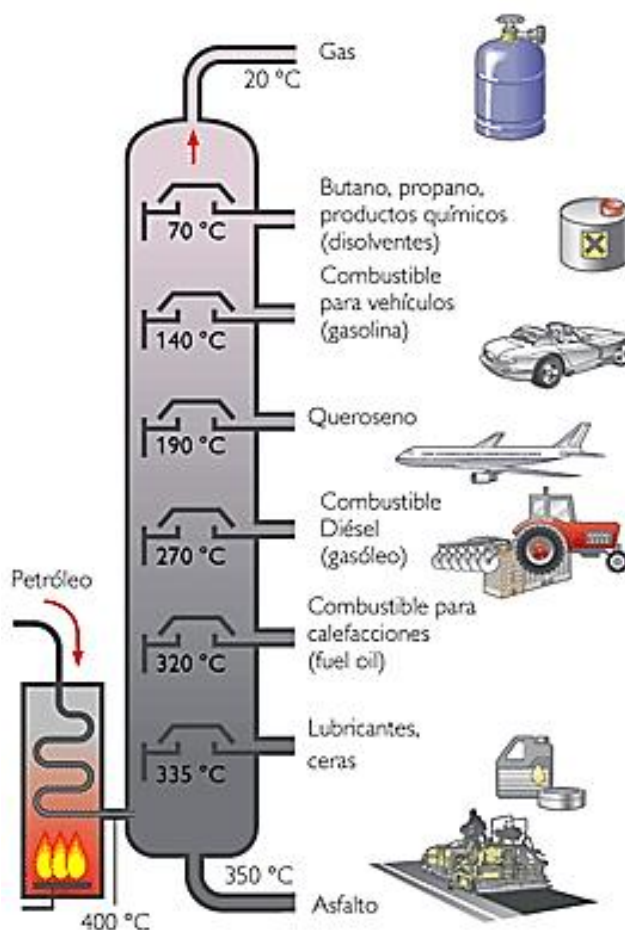


Figura 58. Diagrama columna de fraccionamiento de petróleo («Foro: Fraccionamiento del petroleo (1/1)»).

### 7.6.2. Desarrollo

El petróleo es un compuesto químico complejo en el que coexisten partes sólidas, líquidas y gaseosas. Lo forman, por una parte, unos compuestos denominados hidrocarburos, formados por átomos de carbono e hidrógeno y, por otra, pequeñas proporciones de nitrógeno, azufre, oxígeno y algunos metales. Se presenta de forma natural en depósitos de roca sedimentaria y sólo en lugares en los que hubo mar. Su color es variable, entre el

ámbar y el negro y el significado etimológico de la palabra petróleo es aceite de piedra, por tener la textura de un aceite y encontrarse en yacimientos de roca sedimentaria («Todo acerca del Petróleo - Monografias.com»). Parafina es el nombre común que reciben los hidrocarburos alcanos de fórmula general  $C_nH_{2n+2}$ , donde n es el número de átomos de carbono se caracterizan por ser productos derivados del petróleo en forma de cera. Por lo general se componen de hidrocarburos sin ramificaciones y en línea recta. Las moléculas más pesadas que están entre C20 y C40 dan como resultado las ceras de parafina, que son su versión sólida («La parafina y sus aplicaciones industriales | QuimiNet.com»).

Las parafinas tienen múltiples usos debido a sus características especiales:

- Son sustancias hidrofóbicas.
- Tiene cualidades termoplásticas.
- Se pueden obtener en altos grados de pureza.
- Tienen punto de fusión bajos.

Algunos de sus usos principales se encuentran en las industrias del caucho, cosméticas, farmacéuticas, etc.

Las parafinas se obtienen en la fracción de destilados pesados durante el proceso de refinamiento del petróleo junto con los lubricantes técnicos y los aceites lubricantes (Quimicas et al.). Nuestra columna de destilación procesa 10.000 litros a la hora de petróleo crudo, lo que supondrá una fracción de destilados pesados de un 40% del crudo procesado (Tabla 28).

Tabla 28. Promedio rendimiento de un barril de crudo («El petroleo y su proceso de refinación (página 2) - Monografias.com»).

<b>Productos livianos (denominados así por su menos densidad y su alta volatilidad)</b>	Gas licuado (GLP)	1-3%
	Gasolinas	21%
	Diesel	22%
	Queroseno	8%
<b>Productos pesados</b>	Diesel marino	8%
	Combustóleo	40%

Por lo tanto, produciremos aproximadamente unos 4000 litros (32000 kg) de destilados pesados por cada hora de trabajo de nuestra columna de destilación.

Primero utilizaremos el programa EPISuite (Anexo 13) para calcular los valores necesarios para realizar un diagrama de cargas y descargas con Mackay Level II posteriormente. Utilizaremos la herramienta TANKS para calcular también posibles fugas tanto del crudo como de los hidrocarburos pesados.

### 7.6.3. Resultados

Introducimos los datos que nos pide Mackay Level III y nos devuelve este diagrama (Figura 59) con los cálculos pertinentes (Anexo 14).

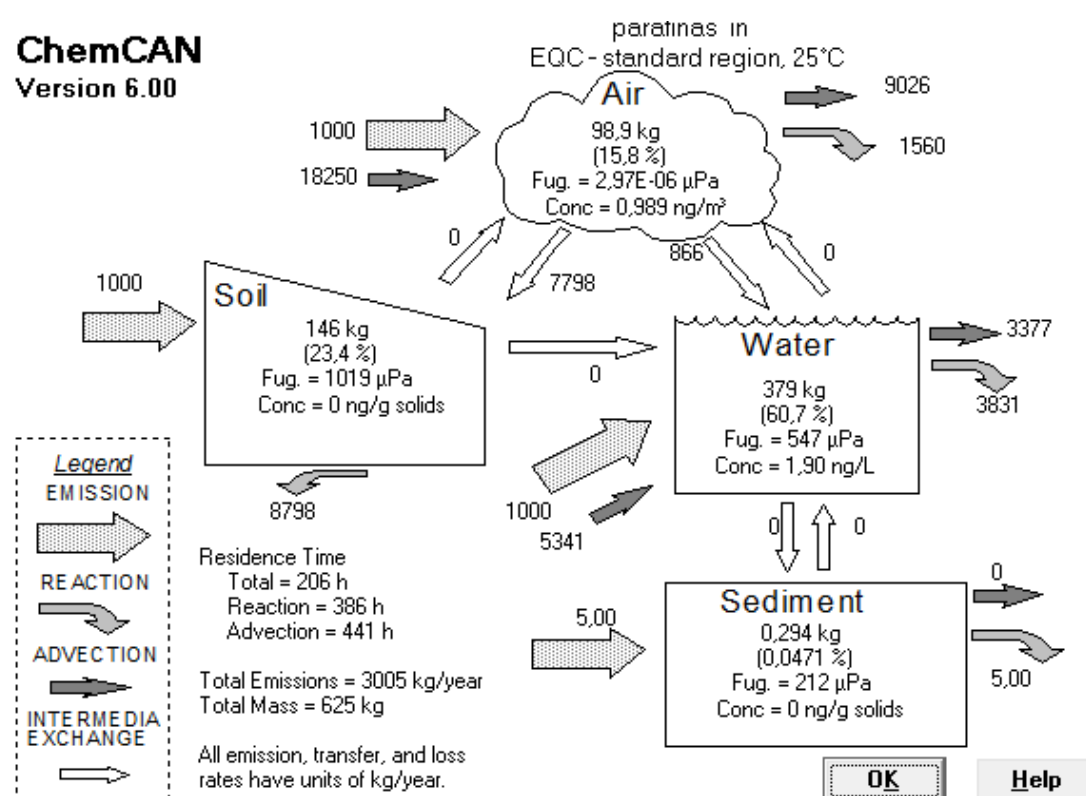


Figura 59. Diagrama descargas y sub-descargas Mackay Level III («CEMC - Level III Model»).

En el diagrama anterior tenemos esquematizadas las descargas a cada uno de los medios y los datos clave de la sustancia química en cada caso. En la Tabla 29 aparecen resumidos estos datos para mayor facilidad de comprensión.

Tabla 29. Tabla resultados Mackay Level III para la emisión de parafinas.

<b>Tiempo de residencia total</b>	206 h
<b>Tiempo de residencia de reacción</b>	386 h
<b>Tiempo de residencia de advección</b>	441 h
<b>Medio de emisión</b>	Aire, suelo, agua y sedimentación
<b>Fugacidad Aire</b>	2.97-06 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Aire</b>	0.989 $\text{ng}/\text{m}^3$
<b>Fugacidad Agua</b>	547 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Agua</b>	1.90 $\text{ng}/\text{l}$
<b>Fugacidad Suelo</b>	1019 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Suelo</b>	0 $\text{ng}/\text{g}$
<b>Fugacidad Sedimentación</b>	212 $\mu\text{Pa}$
<b>Concentración Sedimentación</b>	0 $\text{ng}/\text{g}$

Una vez terminado el estudio con Mackay Level III estudiaremos las posibles fugas de parafinas durante su almacenaje con la herramienta TANKS.

En este problema concreto el modelo escogido (Figura 60) es un tanque cilíndrico el cual tiene una capacidad de líquido de  $120 \text{ m}^3$  lo que corresponde a un 25% más del volumen necesario de esta manera creamos una cámara de seguridad en el tanque, una longitud de 11,41 m y una anchura de 3,658m.

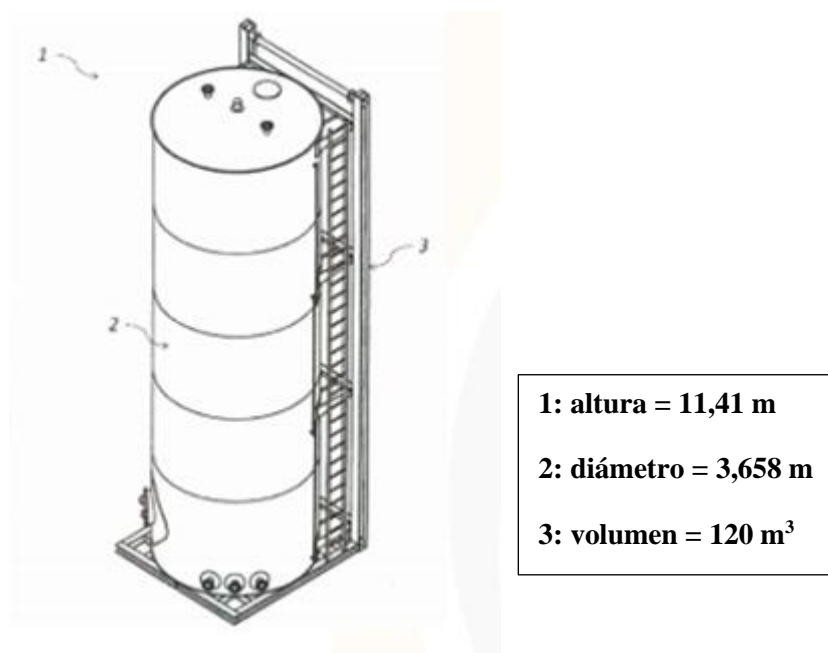


Figura 60. Tanque contenedor de parafinas («Superindustria otorga patente de modelo de utilidad en 3.5 meses a tanque vertical para almacenamiento de fluidos | Superintendencia de Industria y Comercio»).

Teniendo los datos básicos calculados previamente procedemos a introducirlos en el software. Todos los datos introducidos en el programa están recogidos en una Tabla resumen (Tabla 30).

Tabla 30. Tabla resumen datos del problema.

<b>DATOS BÁSICOS DEL PROBLEMA</b>	
<b>Producción diaria de parafina</b>	96 m <sup>3</sup>
<b>Forma del tanque contenedor</b>	Cilíndrico
<b>Volumen teórico tanque contenedor etileno</b>	120 m <sup>3</sup>
<b>Longitud teórica tanque</b>	11,41 m
<b>Diámetro del tanque</b>	3,658 m
<b>Tiempo de residencia de la parafina en el tanque</b>	1 días
<b>Número teórico de tanque necesarios</b>	1 tanque

Estas son las especificaciones de nuestro tanque y por lo tanto los datos con los cuales calculará TANKS las posibles pérdidas y fugas.

El programa nos pide que elijamos una zona en la que situar nuestro tanque en este caso hemos elegido, teniendo en cuenta que solo aparece Estados Unidos en la base de datos, elegimos Chicago (Illinois).

Procedemos a generar nuestro informe (Anexo15) nos aparecen los volúmenes para cada mes que ha contenido el tanque, el cómputo anual y, por último, nos aparecen las pérdidas de peso por trabajo y por respiración del material (Tabla 31).

Tabla 31. Tabla resumen resultados TANKS para el etileno.

<b>RESULTADOS EMISIONES ETILENO</b>	
<b>Número teórico de tanque necesarios</b>	1 tanque
<b>Pérdidas por trabajo</b>	37,75 Tn
<b>Pérdidas por respiración</b>	1,99Tn
<b>Pérdidas anuales por tanque</b>	39,74 Tn
<b>Pérdidas totales anuales</b>	39,74 Tn

Si procesamos estos datos obtenemos la siguiente Tabla resumen de resultados procesados (Tabla 32).

Tabla 32. Inmisiones parafinas para la población de Chicago.

<b>Substancia</b>	<b>Población</b>	<b>Emisiones totales anuales</b>	<b>Inmisiones anuales</b>	<b>Inmisiones diarias</b>	<b>Límites seguros</b>
<b>Parafina</b>	2722000	39,74 Tn	1,46 g	40000 mg	2mg/m <sup>3</sup>

Por lo tanto, cada individuo no llegaría a inhalar dos gramos de producto al año.

#### 7.6.4. Conclusiones

- Para concluir debemos tener en cuenta las Tablas 29 y 32, si el umbral de concentración segura son 2 miligramos el metro cúbico y estamos descargando una cantidad de sustancias como para llegar a una concentración de 0,000989 miligramos el metro cúbico estamos trabajando muy por debajo de la concentración dañina para el ser humano y, por lo tanto, a priori no estamos afectando de manera negativa a la población.
- El programa TANKS nos limita a zonas de Estados Unidos, donde no suelen emplazarse el tipo de instalaciones que hemos analizando y donde no se sitúan núcleos de población tan grandes como el escogido, pero de esta manera hemos podido observar los efectos en un caso crítico.

---

## 8. CONCLUSIONES FINALES

---

A lo largo de este trabajo hemos podido estudiar, analizar, describir y aplicar las múltiples herramientas, software y todas sus diversas funciones. A continuación, desarrollaremos las conclusiones principales extraídas del estudio.

1 Todas las herramientas resultan relativamente nuevas.

Como hemos expuesto a lo largo de todo este trabajo la implicación medioambiental de empresas y gobiernos es relativamente nueva por lo que, estas herramientas están aún en desarrollo. Hay muchas herramientas

2 Herramientas no útiles para sustancias inorgánicas.

Aunque estas herramientas resultan bastante completas presentan grandes lagunas de cálculo a la hora de hablar sobre sustancias inorgánicas. Debido a sus características concretas y repetibles la materia orgánica resulta más sencilla de estudiar. Como hemos podido ver en el cuarto caso de estudio a la hora de trabajar con Arsénico, ya que, para las sustancias inorgánicas las estimaciones del software son inexactas y por lo tanto no son válidas.

3 Herramientas muy específicas.

Todos los software presentados en este trabajo proponen usos muy específicos, de esa manera consiguen cubrir de manera muy detallada un aspecto específico en vez de cubrir de manera general o más superflua todos los aspectos involucrados en un informe de evaluación de impacto medioambiental.

4 No existen herramientas de código abierto para la generación de un informe completo de evaluación de impacto ambiental.

Ninguna de las herramientas que se han estudiado durante este trabajo es capaz de generar o de guiar al usuario para que genere una evaluación de impacto ambiental al completo. Todas estas herramientas son de apoyo para la toma de decisiones de manera concreta en este tipo de informes.

5 La combinación de las herramientas para analizar casos concretos de estudio resulta una manera completa y eficiente de completar una evaluación de impacto medioambiental.

Como hemos podido demostrar en la mayoría de los casos de estudio, las herramientas estudiadas en este trabajo se pueden combinar de muchas maneras y se complementan unas a otras. Podemos concluir de esta manera que todas las herramientas estudiadas tienen fines muy concretos, pero combinándolas podemos obtener información robusta y consistente con la cual cumplimentar una Evaluación de impacto ambiental.

---

## 9. REFERENCIAS

---

- A. NIETO-MÁRQUEZ, A. CAMBRA, F. GUTIERREZ-MARTÍN. (enero 2012). Evaluación de impactos ambientales bióticos en la industria química mediante uso de software libre. CIDIQ, Congreso de Innovación docente en Ingeniería Química.
- CANTER, L.W., [sin fecha]. Source Materials for Environmental Impact Assessment. [en línea], [Consulta: 21 mayo 2017]. Disponible en: <http://ac.els-cdn.com/recursos.biblioteca.upc.edu>
- CENTRO NACIONAL DE REFERENCIA SOBRE CONTAMINANTES ORGÁNICOS PERSISTENTES, [sin fecha]. CNR COP - Convenio de Estocolmo. [en línea]. [Consulta: 15 junio 2017]. Disponible en: <http://www.cnr-cop.es>
- CHEMISTRY, T.C. centre for E.M. and, 2002. CEMC (Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry) - Level III Model. [en línea]. [Consulta: 29 junio 2017]. Disponible en: <http://www.trentu.ca>
- COMMONS, U., [sin fecha]. CAPÍTULO 4: TRANSPORTE DE SUSTANCIAS INERTES Y REACTIVOS CAPÍTULO 4 TRANSPORTE DE SUSTANCIAS INERTES Y REACTIVOS. [en línea], [Consulta: 24 junio 2017]. Disponible en: <https://upcommons.upc.edu>
- CRUZ, V., GALLEGU, E. y GONZALEZ, L., [sin fecha]. EIA09 Proyect Page. [en línea]. [Consulta: 21 junio 2017]. Disponible en: <http://www2.caminos.upm.es>
- DEPARTMENT., T.N.I. of S. and T. (NIST) is an agency of the U.S.C., 2011. BEES, Life Cycle Analysis for building products. [en línea]. [Consulta: 21 junio 2017]. Disponible en: <http://ws680.nist.gov/Bees>
- EPA United States Environmental Protection Agency. (2000). EPI Suite™-Estimation Program Interface. Available: <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface>. Last accessed 26/06/2017.
- EPA United States Environmental Protection Agency. (1985). Integrated Risk Information System. Available: <https://www.epa.gov/iris>. Last accessed 20/06/2017.
- EPA United States Environmental Protection Agency. (2006). TANKS Emissions Estimation Software, Version 4.09D. Available: <https://www3.epa.gov/ttnchie1/software/tanks/>. Last accessed 26/06/2017.
- G.SALAZAR, F., 2011. TERMODINAMICA DEL EQUILIBRIO: CAPÍTULO II, Sistemas No Ideales: 1.Fugacidad y Actividad by. [en línea]. [Consulta: 24 junio 2017]. Disponible en: <https://issuu.com/fsalazar2011/docs/elv>.
- GONZALEZ, J.C., MORELL, M., CRISTIAN, V., LÓPEZ, B., MARTÍNEZ, L., SILVIA, J., RUBIEJO, M., CARBALLO, N., TUTOR, C., BENITO, O. y IV, V., 2010. INGENIERIA QUÍMICA Planta de producción de acetaldehído. [en línea], [Consulta: 8 junio 2017]. Disponible en: <http://www.recercat.cat>
- .....



- GUTIÉRREZ-MARTÍN, F., NIETO-MÁRQUEZ, A., ATANES, E. y RUIZ-PASTRANA, M., 2014. EVALUACIÓN DE IMPACTOS AMBIENTALES BIÓTICOS EN LA INDUSTRIA QUÍMICA MEDIANTE USO DE SOFTWARE LIBRE. *Formación universitaria* [en línea], vol. 7, no. 1, pp. 03-12. [Consulta: 2 mayo 2017]. ISSN 0718-5006. DOI 10.4067/S0718-50062014000100002. Disponible en: <http://www.scielo.cl>
- IZE LEMA, I., ZUK, M., ROJAS-BRACHO, L. y INSTITUTO NACIONAL DE ECOLOGÍA (MÉXICO), 2010. *Introducción al análisis de riesgos ambientales* [en línea]. S.l.: Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. [Consulta: 24 junio 2017]. ISBN 9786077908265. Disponible en: <https://books.google.es>
- LIM, S., 2016. EPI Suite: A Fascinate Predictive Tool for Estimating the Fates of Organic Contaminants. *J Bioremediat Biodegrad* [en línea], vol. 7, no. 7. [Consulta: 8 mayo 2017]. ISSN 2155-6199. DOI 10.4172/2155-6199.1000e171. Disponible en: <https://www.omicsonline.org>
- MINGUEZ, C., COM, V.-V., MARTÍN, G., COM, E.-E., DE PAULA, G., COM, L.-L.D., SALVADOR, G., ES, L.-L.U. y ES, A.-A.U., [sin fecha]. Software para la evaluación de impacto ambiental: EIA09. [en línea], [Consulta: 14 mayo 2017]. Disponible en: <http://www.fdi.ucm.es/profesor/lgarmend/eia09/>.
- OMS | Arsénico. *WHO* [en línea], 2017. [Consulta: 18 junio 2017]. Disponible en: <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs372/es/>.
- OMS | Guías para la calidad del agua potable, tercera edición. *WHO* [en línea], 2013. [Consulta: 19 junio 2017]. Disponible en: [http://www.who.int/water\\_sanitation\\_health/dwq/gdwq3rev/es/](http://www.who.int/water_sanitation_health/dwq/gdwq3rev/es/).
- PASCUAL, J.A., [sin fecha]. 100cia Química - Experiencias de laboratorio - Química de 2º de BAC. [en línea]. [Consulta: 21 junio 2017]. Disponible en: <http://www.100ciaquimica.net/exper/exp2bqui/e2bq24r.htm>.
- QUIMICAS, I., DEL CAPÍTULO, D., KRAUS, R.S., SUMARIO, 8, DE REFINO, P. y PETROLEO, D., [sin fecha]. PETROLEO Y GAS NATURAL @BULLET PROCESO DE REFINO DEL PETROLEO Perfil general. [en línea], [Consulta: 25 junio 2017]. Disponible en: <http://www.insht.es>
- The Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry . (2013). Mackay Level III. Available: <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/L1L2L3.html>. Last accessed 15/06/2017.
- US EPA, O., [sin fecha]. Download EPI Suite™ - Estimation Program Interface v4.11. [en línea], [Consulta: 21 junio 2017]. Disponible en: <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suitetm-estimation-program-interface-v411>.
- US EPA, O., [sin fecha]. Integrated Risk Information System. [en línea], [Consulta: 29 junio 2017]. Disponible en: <https://www.epa.gov/iris>.
- US EPA, O.O. of A.Q.P. and S., [sin fecha]. WATER9, Version 2.0. [en línea], [Consulta: 29 junio 2017]. Disponible en: <https://www3.epa.gov/ttnchie1/software/tanks/#order>.